Hochauflösende Gaschromatographie schwerflüchtiger Verbindungen

– Anhang –

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades eines Doktors der Naturwissenschaften

der Abteilung für Chemie an der Ruhr-Universität Bochum

vorgelegt von Diplom-Chemiker

HOLGER BORWITZKY

aus Hamburg

1981

Hochauflösende Gaschromatographie schwerflüchtiger Verbindungen

– Anhang –

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades eines Doktors der Naturwissenschaften

der Abteilung für Chemie an der Ruhr-Universität Bochum

vorgelegt von Diplom-Chemiker

HOLGER BORWITZKY

aus Hamburg

1981

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41544719_0005

Anhang I

Zusammenstellung der bisherigen Entwicklungen auf dem Gebiet der gaschromatographischen Bestimmung von polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen und der Herstellung von Glaskapillarsäulen unter dem Aspekt der Hochtemperaturgaschromatographie einschließlich der im Rahmen dieser Arbeit publizierten Beiträge.

Tabellen 1 - 7
Abbildung 2
} Kapitel 2 und 3

Tabelle 1: Zur Entwicklung der PAK - Gaschromatographie

Stationäre Phase: Handelsname:	chemische Bezeichnung:	Säulentyp:	untersuchtes Material / Verbindungen	standardisierte Retentionszeiten: / Besonderheiten	Jahr:	Referenz:
DC Hi Vac Grease	Silikonfett	gepackt, 2,5-6 m	Steinkohlenteer	- - - - - -	1959	34
Reoplex 400	Polypropylenglykoladipat		Teeröle			
SE 30	Dimethylpolysiloxan	gepackt, 3 m	Alkylphenanthrene	rel. Retentionszeit	1963	35
QF 1	Methyl-Trifluorpropyl-polysiloxan (50 : 50)	gepackt, 3 m	Alkylphenanthrene	rel. Retentionszeit		
Dow 11		" , 3 m	" "	" "		
Dow 710	Methyl-Phenylpolysiloxan (50 : 50)	" , 3 m	" "	" "		
Apiezon L	Hochmolekulare KW	" , 1,5 m	" "	" "		
BPB	Polyphenyläther	St.K., 70 m	Alkylnaphthaline	" "	1963	36
Apiezon L	Hochmulekulare KW	St. K., 70 m	" "	" "		
Ucon 2000	Polyalkylenglykol	St. K., 70 m i.D. 0,25 mm	" "	" "		
DC 550	Methyl-Phenylpolysiloxan (75 : 25)	St. K., 100 m i.D. 0,25 mm	Dimethylnaphthaline	" "	1964	37
SE 30	Dimethylpolysiloxan	G.K., 35 m i.D. 0,35 mm	Anthracen-Dibenzpyren	" "	1964	19
Apiezon L	Hochmolekulare KW	G.K., 18 m	Terphenyle	- -	1964	21
SE 52	Methylphenylpolysiloxan (95 : 5)	G.K., 30 m i.D. 0,3 mm	" "	- -		

Tabelle 1, Fortsetzung: Zur Entwicklung der PAK-Gaschromatographie

Stationäre Phase: Handelsname:	chemische Bezeichnung:	Säulentyp:	untersuchtes Material / Verbindungen	standardisierte Retentionszeiten / Besonderheiten	Jahr:	Referenz:
SE 30	Dimethylpolysiloxan	G.K., 30 m	Anthracen-1,3,5-Triphenylbenzol	rel. Retentionszeit	1965	20
SE 52	Methylphenylpolysiloxan (95 : 5)	G.K., 50 m	Naphthalin-Coronen	lineare, Indices		
XE 60	Methyl-Cyanoäthylpolysiloxan (75 : 25)	G.K., 35 m i.D. 0,35 mm		ECD-Detektion		
Apiezon L	Hochmolekulare KW	G.K., 35 - 55 m	Aza-Paks	rel. Retentionszeit	1966	38
SE 52	Methylphenylpolysiloxan (95 : 5)	G.K., 50 m		Kovats-Indices		
XE 60	Methyl-Cyanoäthylpolysiloxan (75 : 25)	G.K., 24 u. 70 m i.D. 0,42 - 0,30 mm		" "		
Apiezon L	Hochmolekulare KW	St. K., 100 m i.D. 1 mm	Anthracenöl		1966	39
Apiezon M	Hochmolekulare KW	St.,K., 50 m i.D. 0,25 mm	Anthracenöl	rel. Retentionszeit Inden-3-Methylpyren N-Basen		
OS 138	Poly-m-Phenyläther (6 - Ringe)	St., K., 50 m i.D. 0,25 mm	Anthracenöl	rel. Retentionszeit Inden-3-Methylpyren N-Basen		
SE 52	Methyl-Phenylpolysiloxan (95 : 5)	gepackt, 4 m	Ruß Acenaphthylen-Coronen	Eluens für UV-Detektion aufgefangen	1967	40
SE 52	Methylphenylpolysiloxan (95 : 5)	G.K., 65 m i.D. 0,30 mm	Zigarettenrauchkondensat Naphthalin-Coronen	rel. Retentionszeit lineare Indices	1967	41
Polysev	Poly [m] phenyläther, 7 Ringe	St.K., 300 m	Pyrolyseprodukte von CH_4	rel. Retentionszeit	1967	42
G 60	Sojabohnenölepoxid	St.K., 30 m	Naphthalin-Pyren	" "		
	Copolymer, nicht kommerziell erhältlich	ST.K., 30 m i.D. 0,76 mm		GC - MS		
Polysev	Poly [m] phenyläther, 7 Ringe	St. K., 300 m i.D. 0,76 mm	Pyrolyseprodukte von Isopren		1967	43
			Naphthalin-Pyren	GC - MS		

Tabelle 1, Fortsetzung: Zur Entwicklung der PAK-Gaschromatographie

Stationäre Phase: Handelsname:	chemische Bezeichnung:	Säulentyp:	untersuchtes Material /Verbindungen	standardisierte Retentionszeiten /Besonderheiten	Jahr:	Referenz:
	Polyphenyläther	PLOT	Naphthalin-Anthracen	- -	1968	44
SE 52	Methylphenylpolysiloxan (95 : 5)	PLOT				
PPE 20	Poly [m] phenyläther, 20 Ringe	gep. 1,5 u. 20m	Perhydropyren-Dibenzo-anthracen	-- --	1969	45
OV 1	Dimethylpolysiloxan	gep. 1,5 u. 20m	Benzopyren			
OV 101	Dimethylpolysiloxan	St. K., 10 m i.D. 0,25 mm	Phenanthren-Perylen n C_{28} - n C_{56}	-- --	1970	46
	graphitierter Ruß	G.K., 8,5 u. 20 m i.D. 0,5mm	Naphthalin-Dibenzo-anthracen	-- --	1970	47
SE 30	Dimethylpolysiloxan	gep. 3 m	Pyren-1,3,5-Triphenyl-benzol	Eluens Split für FID u. UV-Absorption	1970	48
Apiezon L	Hochmolekulare KW	St. K., 100 m i.D. 0,25 mm	Alkylnaphthaline und -biphenyle	rel. Retentionszeit GC-MS	1970	49
BPB	Poly[m]Phenyläther	St. K., 50 m i.D. 0,25 mm				
	Polyalkylenglykoladipat	St. K., 50 m i.D. 0,25 mm	" "			
OV 7	Methyl-Phenylpolysiloxan (80:20)	g.b. 7 m	Phenanthren-Dibenzo-pyren	-- --	1971	50
	p,p'-Azoxyphenetol	gep.	Dimethylnaphthaline	rel. Retentionszeit	1971	51
UCON HB 5100	Polyäthylenglykoläther	G.K., 120 m i.D. 0,32 mm	Tabakrauchkondensat -Fluoren	GC - MS	1971	52

Tabelle 1, Fortsetzung: Zur Entwicklung der PAK - Gaschromatographie

Stationäre Phase: Handelname:	chemische Bezeichnung:	Säulentyp:	untersuchtes Material /Verbindungen	standardisierte Retentionszeiten / Besonderheiten:	Jahr:	Referenz:
DEXSIL 300	Dimethylpolycarboransiloxan	gep., 1,8 m	Fluoren-Perylen	ECD + Fluorescenz-detektion	1971	53
OV 101	Dimethylpolysiloxan	gep., 10 m	Autoabgase	rel. Retentionszeit	1972	29
OV 17	Methylphenylpolysiloxan (50 : 50)	St. K., 50 m	Naphthalin-Dibenzo-pyren	Kovats Indices GC - MS		
PMPE	m-Polyphenyläther, 20 Ringe	gep., 42 m	Steinkohlenteer, Inden-Coronen	- -	1972	54
Apiezon L + Betone 34	Hochmolekulare KW + Dimethyl-di-octadecylammonium-montmorrillonit	gep., 2 m	Phenanthren, Anthracen	- -		
flüssige Kristalle	4-(2,2'-Äthoxyäthoxy-carbäthoxy-oxyzimtsäureester des 4-Hydroxy-4'-methoxy-azobenzols	gep., 4 m	Dimethylnaphthaline	- - -		
FFAP	Nitroterephthalsäure mit Polyäthylenglycol verestert	gep., 4 m				
OV 7	Methyl-Phenylpolysiloxan (80 : 20)	gep., 5,4 m	Fluoren-Dibenzcarbarol	- -	1973	55
Versamid 900	Polyamid	G.K., 40 m	Luftstaub, Aza-PAKs	- -	1973	56

Tabelle 1, Fortsetzung: Zur Entwicklung der PAK - Gaschromatographie

Stationäre Phase: Handelsname:	chemische Bezeichnung:	Säulentyp:	untersuchtes Material /Verbindungen:	standardisierte Retentionszeiten / Besonderheiten:	Jahr:	Referenz:
DEXSIL 300	Dimethylpolycarboransiloxan	gep., 4 m SCOT, 12 m i.D. 0,32 mm	Luftproben Biphenyl-Dibenzopyren	GC - MS - -	1973	57
SF 96 OV 101	Dimethylpolysiloxan	G.K., 20 m i.D. 0,32 mm	Pyren-Benzo[b]chrysen		1973	58
Apiezon L	Hochmulekulare KW	St. K., 50 m i.D. 0,25 mm	Naphthalin-Pyren		1973	59
	Carboranpolymer	G.K., 50 m i.D. 0,3 mm	Tabakrauchkondensat bis Dibenzpyren		1972	22
SE 52	Methyl-Phenylpolysiloxan (95 : 5)	G.K., 70 m i.D. 0,29 mm	Naphthalin- Picen	- -	1974	23
CW 20 M	nicht extrahierbarer Rückstand von thermisch behandelten Polyäthylenglykol	gep., 1,5 m	Naphthalin-Coronen	- -	1974	60
PZ 179	Polyphenyläthersulfon	gep., 3 m	Diphenylanthracen-Phenanthren	-	1974	61
OV 101	Dimethylpolysiloxan	G.K., 50 m i.D. 0,27 mm	Naphthalin-Coronen		1974	62
OV 101	Dimethylpolysiloxan	G.K., 5,5 m i.D. 0,32 mm	Coronen-Rubren	- -	1974	63

Tabelle 1, Fortsetzung: Zur Entwicklung der PAK - Gaschromatographie

Stationäre Phase: Handelsname:	chemische Bezeichnung:	Säulentyp:	untersuchtes Material /Verbindungen:	standardisierte Retentionszeiten: /Besonderheiten:	Jahr:	Referenz:
OV 101	Dimethylpolysiloxan	G.K., 50 m i.D. 0,25 mm	Naphthalin-Coronen	- -	1974	64
DEXSIL	Polycarboransiloxan	100 m	Luftproben, Autoabgase	GC - MS	1974	65
Apiezon L	Hochmolekulare KW	St. K. 100 m i.D. 0,2 mm	Naphthalin und alkyl-derivate	Kovats-Indices rel. Retentionszeit	1974	66
DEXSIL 300	Dimethylpolycarboransiloxan	gep., 1,8 m	Anthracen-Coronen	rel. Retentionszeit ECD, Fluorescenz-detektion	1974	67
SE 52	Methyl-Phenylpolysiloxan (95 : 5)	G.K., 22 m i.D. 0,26 mm	Motorenöl Naphthalin-Dibenzo-anthracen	N-FID	1975	24
SE 30	Dimethylpolysiloxan	G.K.,25m i.D. 0,32 mm	Steinkohlenteerextrakt		1975	68
		St. K.,	gecracktes Erdöl S-Heteroyden Thiophen-Benzonaphthothiophen	GC - MS Auflösung 2000	1975	69
DEXSIL 300	Dimethylpolycarboransiloxan	gep., 4 m	Luftstaubproben	GC - MS	1975	70
DEXSIL 400	Methyl-Phenylpolycarboran-siloxan (90 : 10)		Steinkohlenteer, flüchtige Bestandteile des Steinkohlen-teers.			
DEXSIL 410	Methyl-Nitrilpolycarbon-siloxan (90 : 10)		Holzimprägnierungsmittel			

Tabelle 1, Fortsetzung: Zur Entwicklung der PAK - Gaschromatographie

Stationäre Phasen: Handelsname:	chemische Bezeichnung:	Säulentyp:	untersuchtes Material /Verbindungen	standardisierte Retentionszeiten: / Besonderheiten:	Jahr	Referenz:
OV 1	Dimethylpolysiloxan	gep., 1,5 m	Biphenyl-Anthanthren	GC-MS	1975	70
MBBT	N,N'- bis(p-methoxybezyliden) -2,2'-bi-p-toluidin	gep. , 1,8 m	Methylnaphthalin-Dibenzoanthracen	- -	1975	71
OV 1	Dimethylpolysiloxan	G.K., 22 m i.D. 0,28 mm Fremdhersteller	Phenanthren-Coronen	GC - MS	1975	72
OV 101	Dimethylpolysiloxan	gep., 1,8 m	Phenanthren-Chrysen	rel. Retentionszeit in Vergleich auf den aufgeführten stat. Phasen	1975	73
OV 17	Methylphenylpolysiloxan (50 : 50)		Tabakrauchkondensat			
OV 22	Methylphenylpolysiloxan (35 : 65)					
OV 25	Methylphenylpolysiloxan (25 : 75)					
Apiezon W						
SF 96	Dimethylpolysiloxan	G.K., 40 m i.D. 0,32 mm	Trinkwasserproben Toluol-Fluoranthen		1975	74
SE 52	Methylphenylpolysiloxan (95 : 5)	G.K., 11 m i.D. 0,26 mm	Marijuana in Tabak-rauchkondensat Methylindol-Quaterphenyl	GC - MS	1976	26
SE 52	Methylphenylpolysiloxan (95 : 5)	G.K., 11 m i.D. 0,26 mm	Luftstaubproben Dibenzothiophen-Dibenzo-pyren	GC - MS	1976	27

Tabelle 1, Fortsetzung: Zur Entwicklung der PAK - Gaschromatographie

Stationäre Phase: Handelsname:	chemische Bezeichnung:	Säulentyp:	untersuchtes Material /Verbindungen:	standardisierte Retentionszeiten / Besonderheiten:	Jahr:	Referenz:
SE 52	Methylphenylpolysiloxan (95 : 5)	G.K., 12 m i.D. 0,26 mm	Schellfisch Naphthalin-Dibenzpyren	GC - MS	1976	28
OV 101	Dimethylpolysiloxan	gep., 20 m	Fluoranthen-Anthanthren	50.000 theor. Böden	1976	75
BBBT	N,N'- bis [p-butoxybenzyliden]- - α,α'- bis-p-toluidin	gep., 1,8 m	Phenanthren-Benzo[a]-pyren	- -	1976	76
B Ph BT BH BT	N,N'- bis [p-phenylbenzyliden]- α,α'- bi -p-toluiden N,N'- bis [p-hexyloxybenzyliden] α,α'- bi -p-toluidin	gep., 1,8 m	Fluoranthen-Dibenzpyren	die Phasen werden als Mischphasen eingesetzt.	1976	77
SE 52	Methyl-Phenylpolysiloxan (95 : 5)	G.K., 19 m i.D. 0,26 mm	Ruß, Naphthalin-Coronen, S-Heterocyclen	GC - MS	1976	78
OV 1 OV 17	Dimethylpolysiloxan Methylphenylpolysiloxan	gep., 3 m		GC - MS chem. Ionisation	1976	79
	C_{87} H_{176} mehrfach verzweigt	gep., 2,4 m	Tetrahydronaphthalin-Azulen	Kovats Indices	1976	80
OV 3	Methylphenylpolysiloxan (90 : 10)	G.K., i.D. 0,24 mm	Biphenyl-Dibenzanthracen	coating-efficiency 178 %	1976	81

Tabelle 1, Fortsetzung: Zur Entwicklung der PAK - Gaschromatographie

Stationäre Phasen: Handelsname:	chemische Bezeichnung:	Säulentyp:	untersuchtes Material /Material:	standardisierte Retentionszeit: / Besonderheiten:	Jahr:	Referenz:
SE 52	Methyl-Phenyl-Vinylpolysiloxan (95 : 5)	G.K., 50 m i.D. 0,38 mm	getrockneter Mais Phenanthren-Coronen	untere Nachweisgrenze, 0,25ng für Benzo[a]pyren	1977	82
SE 52	Methylphenylpolysiloxan (95 : 5)	G.K., 40 m i.D. 0,71 mm	Naphthalin-Perylen	- - - -	1977	83
SE 52	Methylphenylpolysiloxan (95 : 5)	G.K., 13 m i.D. 0,3 mm	Phenanthren-Coronen	Filmdicke 18 nm	1977	84
OV 1	Dimethylpolysiloxan	G.K., 50 m i.D. 0,34 mm	Naphthalin-Coronen	- - -	1977	85
OV 101	Dimethylpolysiloxan	G.K., 20 m i.D. 0,25 mm				
POLY S 179	Polysulfonphenyläther	gep., 5 m	Phenanthren - Benzo[a]-coronen	- - -	1977	86
OV 101	Dimethylpolysiloxan	G.K., 18 m i.D. 0,27 mm	Naphthalin-Anthanthren	GC - MS	1977	87
OV 101	Dimethylpolysiloxan	G.K., 20 m i.D. 0,36 mm Fremdhersteller	Naphthalin-Dibenz-anthracen Heterocyclen Anthracenöl		1977	88

Tabelle 1, Fortsetzung: Zur Entwicklung der PAK - Gaschromatographie

Stationäre Phasen: Handelsname:	chemische Bezeichnung:	Säulentyp:	untersuchtes Material / Verbindungen:	standardisierte Retentionszeiten / Besonderheiten:	Jahr:	Referenz:
PIB	Polyisobutylen	gep., 1 m	Fluoren-Dibenzanthracen	rel. Retentionszeiten rel. molare Lösungs-enthalpien,-entropien der PAKs in den stat. Phasen	1977	89
E - 301	Dimethylpolysiloxan	gep., 1 m	" " "			
SE 52	Methylphenylpolysiloxan (95 : 5)	gep. , 1 m	" " "			
DEXSIL 300	Dimethylpolycarboransiloxan	gep., 1 m	" " "			
SKTFT	Trifluorpropylpolysiloxan	gep., 1 m	" " "			
OV 17	Methylphenylpolysiloxan (50 : 50)	gep., 1 m	" " "			
PF MS-6	Methylphenylpolysiloxan (50 : 50))	gep., 1 m	" " "			
CARBOWAX 20 M	Polyäthylenglykol, thermisch behandelt, nicht vom Untergrund extrahierbar.	gep., 3 m	Fluoren-Benzo[a]pyren	Kovats Indices	1978	90
OV 101	Dimethylpolysiloxan	gep., 3 m	Naphthalin-Chrysen	experimentelle und berechnete Elutionstemperatur	1978	91
OV 101	Dimethylpolysiloxan	PLOT 23 m	Naphthalin-Pyren			
SE 52	Methylphenylpolysiloxan (95 : 5)	G.K. 25 m i.D. 0,25 mm kommerziell	Inden-Pyren			
Apiezon L	Hochmolekulare KW	PLOT 13 m	Fluoren-Phenanthren			
OV 101	Dimethylpolysiloxan	G.K., 15 m i.D. 0,51 mm	Kohlenextraktionsprodukte, Benzol-Chrysen	GC - MS		92

Tabelle 1, Fortsetzung: Zur Entwicklung der PAK - Gaschromatographie

Handelsname:	chemische Bezeichnung: Herstellung	Säulentyp:	untersuchtes Material /Verbindungen:	standardisierte Retentionszeiten: / Besonderheiten:	Jahr:	Referenz:
CARBOWAX 20 M	Polyäthylenglykol, thermisch behandelt, nicht vom Untergrund extrahierbar	G.K. 60 m i.D. 0,20 mm	Teer Acenaphthylen-Coronen	Einfluß der Glassorte auf das bleeding der stat. Phase.	1978	93
SP 2100	Dimethylpolysiloxan	G.K., 16 m i.D. 0,20 mm	Acenaphthylen-Coronen			
Methylphenyl-polysiloxan	Solvolyse von Methylphenyl-dichlorsilan und Trichlorsilan Methyl : Phenyl = 11 : 10	G.K., 18 u.20 m i.D. 0,22 mm	Teer und Holzteer Acenaphthylen-Coronen	in situ Polymerisation und chem. Bindung d. stat. Phase mit der Glasoberfläche	1978	94
SE 52	Methylphenylpolysiloxan (95 : 5)	G.K., 20 m i.D. 0,3 mm	Binnensee - Sedimente Fluß - Sedimente Biphenyl-Coronen	GC - MS	1978	95
SP 400	Methyl-p-Chlorphenylpolysiloxan (98 : 11)	G.K., 36 m	Dimethylnaphthalin, Naphthalin-4-Methylbiphenyl	rel. Retentionszeiten	1978	96
Reoplex 400	Polypropylenglykoladipat	G.K., 62 m	" "	" "		
Amin 220	1-Hydroxy-2-heptadecenyl-imidazolin			" "		
Ucon + TCEP	Polypropylenglykol + Triscyanoäthoxypropan	G.K., 44 m	" "	" "		
	p,p´-Asoxyphenetol	G.K., 21 m	" "	" "		
Bentone 34 + Didecylphthalat	Bentone 34 =Dimethyldioctadecyl-ammonium-montmorrilloint	G.K., 20 m i.D. 0,25 - 0,28 mm	" "	" "		

Tabelle 1, Fortsetzung: Zur Entwicklung der PAK - Gaschromatographie

Stationäre Phasen: Handelsname:	chemische Bezeichnung:	Säulentyp:	untersuchtes Material / Verbindungen	standardisierte Retentionszeiten: / Besonderheiten:	Jahr:	Referenz:
Poly S 179	Polysulfonphenyläther	G.K., 90 m	Steinkohlenteer	Einfluß auf die Glassorte	1978	97
			Naphthalin-Coronen	auf das bleeding		
SE 54	Methyl-Phenyl-Vinylpolysiloxan (94 : 5 : 1)	G.K. 45 m	Benzo[a]anthracen-Perylen	d. stat. Phase		
OV 101	Dimethylpolysiloxan	G.K., 30 m i.D. 0,25 mm	Rauch von Tabakersatzstoffen Fluoren-Perylen	GC - MS	1978	98
SE 30	Dimethylpolysiloxan	G.K., 30 m i.D. 0,4 - 0,6 mm	Luftstaubproben Phenanthren-Perylen	Filmdicken 0,1 - 1µm, die besten Resultate mit 0,5 - 0,6 µ	1979	99
Poly S 179	Polysulfonphenyläther	G.K., 90 m	Steinkohlenteer Naphthalin-Coronen	GC - MS	1979	100
OV 61	Methylphenylpolysiloxan (67 : 33)	G.K., 30 m	Methylenphenanthren-Anthanthren			
OV 7	Methylphenylpolysiloxan (80 : 20)	G.K., 30 m				
SE 54	Methyl-Phenyl-Vinylpolysiloxan (94 : 5 : 1)	G.K., 45 m i.D. 0,27 mm	Naphthalin-Coronen	rel. Retentionszeiten bei verschiedenen Temp.		
SE 54	Methyl-Phenyl-Vinylpolysiloxan (94 : 5 : 1)	G.K., 50 m i.D. 0,35 mm kommerziell	Luftproben 2-Methylnaphthalin-Dibenzpyren	GC - MS ECD +FID in Parallelschaltung	1979	101
SE 54	Methyl-Phenyl-Vinylpolysiloxan (94 : 5 : 1)	G.K., 50 m i.D. 0,35 mm kommerziell	Luftproben	GC - MS	1979	102

Tabelle 1, Fortsetzung: Zur Entwicklung der PAK - Gaschromatographie

Stationäre Phase		Säulentyp	untersuchtes Material / Verbindungen	standardisierte Retentionszeiten/ Besonderheiten	Jahr	Referenz
Handelsname	chemische Bezeichnung					
SE 52	Methylphenylpolysiloxan (94 : 5 : 1)	G.K., 33 m i.D. 0,5 mm G.K., 16,6 m i.D. 0,25 mm	Naphthalin-Dibenzopyren	lineare Indices	1979	103
OV 17	Methylphenylpolysiloxan (50 : 50)	G.K., 25 m	Naphthalin-Fluoren	lineare Indices	1979	104
OV 275	Cyanopropyl-Phenylpolysiloxan	G.K., 25 m i.D. 0,28 mm kommerziell	Naphthalin-Fluoren			
SE 52	Methylphenylpolysiloxan (95 : 5)	G.K., 12 m i.D. 0,29 mm	Dehydronaphthalin-Dibenzochrysen	lineare Indices Filmdicke 0,17 und 0,34 µm	1979	105
OV 1	Dimethylpolysiloxan	G.K. 50 m i.D. 0,23 mm	Alkylnaphthaline Alkylazulene	Kovats Indices	1979	106
Ucon LB 550 X	Polypropylenglycol	G.K., 70 m i.D. 0,23 mm		" "		
Ucon HB 280 X	Polypropylenglycol	G.K., 70 m i.D. 0,23 mm		" "		
GTR Sterling MT	graphitierter Ruß	gep., 1,9 m		" "		
Methylpolysiloxan	Solvolyse von Dimethyldi- und Methyltrichlorsilan	G.K., 20 m i.D. 0,22 mm	Luftstaub, Holzverbrennungsprodukte Phenantren-Coronen		1979	107

Tabelle 1, Fortsetzung: Zur Entwicklung der PAK - Gaschromatographie

Stationäre Phase		Säulentyp	untersuchtes Material/ Verbindungen	standardisierte Retentionszeit/ Besonderheiten	Jahr	Referenz
Handelsname	chemische Bezeichnung: Herstellung					
BMBT	N,N'-bis [p-butoxybenzyliden]- α,α'-bis -p-toluiden	gep. 2 m	Naphthalin-Coronen	Kovats Indices	1979	108
Dexsil 400	Methyl-/Phenylpoly-carboransiloxan	G.K. 50 m i.D. 0,27 mm	Inden - Coronen	FID u. N-FID - Paralleldetektion	1979	109
Methylpoly-siloxan	Vorbehandlung mit $SiCl_4$ Solvolyse von Dimethyl-dichlorsilan	G.K., 20 m i.D. 0,22 mm	Luftstaub Teerverbrennungs-produkte		1979	110
	N,N'-Bis(R-benzyliden) -α,α'-bi-p-toluidin R=methoxy-oktoxy, phenyl, anisyl	St. K., i.D. 0,75 mm und gepackte Säule	Testmischungen		1979	111
Sterling MT D 4 GTCB	graphitierter Ruß	gepackt, 0,5m	1-3 ringige PAKs und Derivate	$\ln V_s = f(\frac{1}{T})$	1979	112
	N,N'-Bis (p-phenyl-benzyliden)-α,α'-bi-p-toluidin	gepackt, 3 m gepackt, 1,8 m	$C_{20}H_{12}$-Isomere	rel. Retentionszeiten Auflösung $\log V_s = f(\frac{1}{T})$	1979	113

Tabelle 1: Fortsetzung Entwicklung der PAK - Gaschromatographie

Stationäre Phase		Säulentyp	untersuchtes Material/ Verbindungen	standardisierte Retentionszeit/ Besonderheiten	Jahr	Referenz
Handelsname	chemische Bezeichnung: Herstellung					
SE 52	Methyl-/Phenylpolysiloxan	G.K. 10m x 0,29 mm	Luftstaub	GC-MS mit chem. Ionisation b. 350 eV MS-Unterscheidung v. PAK-Isomeren	1979	114
Dexsil 300	Dimethylpolycarboransiloxan	gep., 2 m	Steinkohlenteer Inden/Pyren	2 dimensionale GC mit gepackten Säulen, backflush	1980	115
FFAP	derivatisiertes Polyäthylen-glykol					
UCON 50 HB 2000	Polyalkylenglykol	G.K. 50 . u. 20 m i.D. 0,25 mm	basische Fraktion eines SRC-Extraktes	GC-MS, lineare Indices	1980	116

Abbildung 3:

Abhängigkeit der Kovats-Indices von Testverbindungen von der Filmdicke d_f der stationären Flüssigkeit

Glaskapillaren : Längen 25 m, i.D. 0,27 mm

Vorbehandlung : Alkaliglas HCl -, HF - geätzt, mit Emulphor ON 870 desaktiviert

Elutionstemperatur : 80 °C

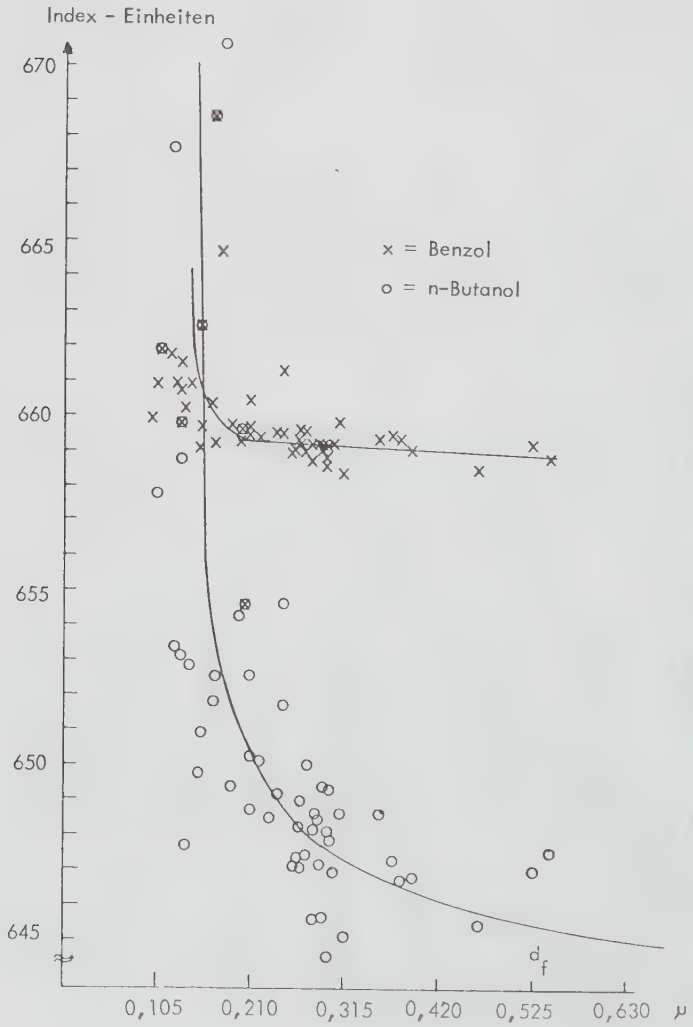


Tabelle 2: In Glaskapillaren aufgebrachte feindisperse Materialien

Aufgetragenes Material:	Stationäre Phasen:	Autor:	Jahr:	Literatur:
Kieselgur Maispulver	Polypropylenglykol	Kaiser	1968	187
graphitierter Ruß	----------	Vidal-Madjar et al.	1970	47
Silanox (silanisiertes, feindisperses Kieselgel)	SE 30	German, Horning	1973	188
Silanox (silanisiertes, feindisperse Kieselsäure)	SE 30 Silar 5 CP	Horning et al.	1974	189
Silanox	SP 2401 OV 17, PZ 176	van Hout et al.	1974	190
Kieselgur Glaspulver	Carbowax 20 M SE 30	Cronin	1974	191
graphitierter Ruß	FFAP, SP 1000 Apiezon L, CW 20 M SE 30, SE 52	Goretti Liberti Nota	1975	192

Tabelle 2, Fortsetzung: In Glaskapillaren aufgebrachte feindisperse Materialien

Aufgetragenes Material	Stationäre Phasen	Autoren	Jahr	Literatur
NaCl	OV 101, SE 30 SF 96	Watanabe Tomita	1975	193
Silanox Hiflo Super Cel (Diatomenerde) Chromosorb R-6740-1 (Diatomenerde)	SE 30 SE 30, OV 225 SE 30, OV 225	Deelder, Ramaekers van den Berg Wetzels	1976	194
NaCl Cab-o-Sil (amorphes Kieselgel)	OV 225 OV 225	Franken Rutten, Rijks	1976	195
Kollodiale Kieselsäure	FFAP, Apiezon L UCON 50 HB 5100	Schulte	1976	196
$BaCO_3$	16 verschiedene apolar bis stark polar	K. Grob G. Grob	1976	197
Cab-o-Sil	OV 225	Cramers et al.	1977	198
Quarzpulver	SE 30, XE 60 FFAP, Silar SCP, Squalan	Torline Schnautz	1978	199

Tabelle 2, Fortsetzung: In Glaskapillaren aufgebrachte feindisperse Materialien

Aufgetragenes Material	Stationäre Phasen	Autoren	Jahr	Literatur
NaCl	OV 17, D.E.G.S Apiezon L, OV 225 CW 20 M	Sandra Verstappe Verzele	1978	200
Wasserglas	SE 30, OV 17 UCON 50 HB 5100 OV 225, OV 330 DEGS, CW 400, CW 20M	Badings van der Pol Wassink	1979	201
NaCl	OV 17, Silar 10c Silar 5 c, OV 275 FFAP, CW 20 M OV 225, SP 2401, DEGS	Rutten, de Nijs, Franken	1979	202

Tabelle 3: Behandlung der Glasoberfläche mit gasförmigem Halogenwasserstoff

Halogenwasserstoff	Glassorte	stationäre Phasen	Autoren	Jahr	Lit.
HCl	P N Alkaliglas Sial	Dibutylphthalat, Polyäthylenglykol, Triäthanolamin UCON 550 XB	Tesarik, Novotny	1968	203
HCl		SE 30	Rutten, Lluyten	1972	180
HCl	Alkaliglas	OV 101, Apiezon L, Dexsil 300, CW 20 M, D.E.G.A. OV 225	Alexander, Garzo Pályi	1974	205
HCl	Alkaliglas Pyrexglas	SE 30, OV 210, SP 2401, OV 225, Dexsil 300	Alexander, Rutten	1974	181
HCl , Äther im Durchfluß	Alkaliglas Schott AR	12 Phasen, Polaritätsbereich Squalan - FFAP	Schomburg, Husmann Weeke	1974	62
2 x HCl, statisch	Alkaliglas PWM , Chance	Dimethylsilicon MS 200, Bis(2-äthylhexyl)sebacat, CW 400, 1,2,3-Triscyanoäthoxypropan, OV 101, OV 17, Hexadekan	Marshall, Parker	1976	206

Tabelle 3, Fortsetzung: Behandlung der Glasoberfläche mit gasförmigem Halogenwasser

Halogenwasserstoff	Glassorte	stationäre Phasen	Autoren	Jahr	Lit.
HCl , dynamisch und statisch	Schott AR Philips Rö 06 B44, Choisy-le-roi	OV 225	Franken Rutten Rijks	1976	195
HF , statisch	Alkaliglas Borsilikatglas	OV 17 , OV 3	Onuska Comba	1976	81
HCl, statisch	Alkaligläser Unikost, PN	OV 101 , SE 30 , CW 20 M	Krupcik et al.	1976	207
HCl / HF dynamisch	Alkaliglas Schott AR	11 Phasen , Polaritätsbereich OV 1 - CW 20 M	Schomburg et al.	1977	208
HCl, einfach und zweifach	Alkaliglas PWM Chance, England	8 Phasen, Polaritätsbereich von Dimethylpolysiloxan MS 200 - 1,2,3-Triscyanoäthoxypropan	Marshall Parker	1978	209
HCl / HF	Schott AR Borsilikatglas Duran	OV 101, SE 30, SE 54, Poly S 179 Bleeding-Verhalten von Dimethylpolysiloxanen auf geätztem und ungeätztem Alkali- und Borsilikatglas	Schomburg Dielmann Borwitzky Husmann	1978	97

Tabelle 3, Fortsetzung: Behandlung der Glasoberfläche mit gasförmigem Halogenwasserstoff

Halogenwasserstoff	Glassorte	stationäre Phasen	Autoren	Jahr	Lit.
HCl HF nach vorhergehender H_2O-Behandl.	Schott AR	OV 1, OV 101, OV17, Dexsil 400, SE 52, SE 54	Schomburg Husmann Borwitzky	1979	109
1% wässr. HF HCl	Alkaliglass Chance, PWM	OV 101; 1,2,3-Triscyanoäthoxypropan, SP 1000 Belegung vor u. nach therm. Behandlungen	Marshall Sanderson	1979	210

Tabelle 4: Behandlung von Glaskapillaren mit aciden Solventien

acides Solvens	weitere Behandlung	Glassorte	stationäre Phasen	Autoren	Jahr	Lit.
1 % wässr. HF 10 % wässr. H Cl	5 % KOH in Methanol	Borsilikatglas	Polyäthylenglykole Methyl-Trifluorpropyl- und β-Cyanoäthylpolysiloxan	Ilkova Mistryukov	1971	214
0,3 - 2 % wässr. HF		Borsilikatglas	O V 101	Hirota et al.	1974	215
20 % wässr. H Cl	Ausfällung von $BaCO_3$ Desaktivierung mit CW	Borsilikatglas Alkaliglas	12 Phasen, apolar bis polar polar	Grob	1977	216
10-20 % wässr. KHF_2 6 n wässr. H Cl	Desaktivierung mit CW Hexamethyldisilazan	Borsilikatglas Alkaliglas	OV 101 , SP 1000 OV 17, Poly A 103 UCON 50 HB 5100 CW 20 M	Heckmann Green F.W. Best	1978	217
konz. wässr. H Cl 5 % NH_4HF_2 in Methanol	Desaktivierung mit Carbowax oder Emulphor	Borsilikatglas	SE 52, SE 54	Onuska et al	1977	83
0,5 % wässr. HF	1 % K OH in Methanol	Borsilikatglas	Polyäthylenglykol 40 M	Mistryukov Golovnya Samusenko	1978	218
1 % NH_4HF_2 in Methanol	Desaktivierung mit CW 20 M	Borsilikatglas	OV 101	Onuska Comba	1978	219

Tabelle 4, Fortsetzung: Behandlung von Glaskapillaren mit aciden Solventien

acides Solvens	weitere Behandlung	Glassorte	stationäre Phasen	Autoren	Jahr	Lit.
Reinigung der Glasrohlinge mit Chromschwefelsäure 10 % wässr. HF, konz. HNO_3 Ätzung der gezogenen Glaskapillaren mit: 0,5 % NH_4HF_2 in Methanol 12 n wässr. HCl 1 % wässr. HF 0,5 % wässr. NaOH	Desaktivierung mit CW 20 M	Borsilikatglas	SP 2100	Onuska Afghan Wilkonson	1978	220
19 % wässr. HCl dest. H_2O 88 % HCOOH	Silanisierung mit Hexamethyldisilazan und Trimethylchlorsilan	Alkaliglas Borsilikatglas	OV 101 SE 52	Lee et al.	1979	221
1 % wässr. HF der Glasrohlinge	2 x 3 h stat. Ätzung mit HCl-Gas, verschiedene thermische Behandlungen	Alkaliglas	OV 101 SP 1000	Marschall Sanderson	1979	210
20 % wässr. HCl	Desaktivierung mit Hexamthyldisilazan	Alkaliglas	SE 30, SE 52	Grob	1979	222

Tabelle 5: Behandlung von Glaskapillaren durch thermische Zersetzung von Organohalogenverbindungen.

Thermisch zersetzte Verbindungen :	Behandelte Glasart:	Stationäre Phasen:	Autor:	Jahr	Literatur:
CH_2Cl_2 Polyvinylchlorid	Borsilikatglas	Emulphor, Polyphenyläther, PPG, PEG, 1,2,3Tricyanoäthoxypropan	Grob	1965	224
Ätzäther *)	PN Sial	Dibutylphthalat, PEG 400, Triäthanolamin, PPG	Tesarik Novotny	1966	203
Ätzäther	Pyrex	nicht angegeben	Schieke Commins Pretorius	1975	225
Ätzäther	Pyrex	Squalan, OV 101, Dexsil 410 PEG 40 M		1977	226
Ätzäther	Pyrex	Desaktivierung mit Triäthanolamin, Poly-N-ß-hydroxyäthylaziridin N-Isopropyl-3-azetidinol dann Belegung mit 13 verschiedenen Phasen	Sandra Verzele	1977	227
Ätzäther * - $CHClF-CF_2-O-CH_3$	Pyrex	Desaktivierung wie zuvor auch für polare Phasen	Sandra Verstappe Verzele	1978	228

Tabelle 6: Silylierung von Glaskapillaren

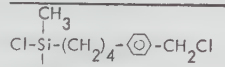
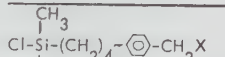
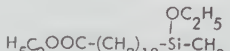
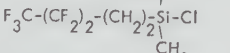
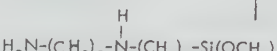
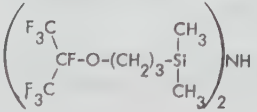
Silylierungsmittel	T [°C]	Vorbehandlung	Stationäre Phasen	Autoren	Jahr	Literatur
Hexamethyldisilazan + Trimethylchlorsilan		Ätzung mit HCl-Gas oder mit Ätzäther	PEG 400, SE 30, UCON 550 XB Triäthanolamin	Novotny, Tesarik	1968	231
Hexamethyldisilazan + Trimethylchlorsilan, Dimethyldichlorsilan, Trimethylchlorsilan, Allyltrichlorsilan, Phenyltrichlorsilan	160	Pyrexglas, unbehandelt	SF 96, Dinonylphthalat	Novotny, Bartle	1970	232
Hexamethyldisilazan + Trimethylchlorsilan	150 - 360 200 °C Optimum	Pyrexglas, ungeätzt + HCl-geätzt	SE 30	Rutten, Luyten	1972	180
	nicht angegeben		PPG, PEG und modifiziertes PEG	Novotny, Grohmann	1973	233
 X = Cl, CN, OH    	nicht angegeben	Alkaliglas es wurde untersucht, mit welchen Kombinationen an Silylierungsmittel / stationärer Phase man möglichst kleine Kontaktwinkel erhält.	UCON 50-HB-2000 2,2'- Oxydipropionitril, Dinonylphthalat, Triäthanolamin OV 210, 1,2,3-Triscyanoäthoxy-propan, SF 96 Di-(2-äthylhexylsebacat) Dinonylphthalat	Bartle, Novotny	1974	234

Tabelle 6, Fortsetzung: Silylierung von Glaskapillaren

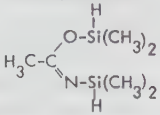
Silylierungsmittel	T [°C]	Vorbehandlung d. Glaskapillaren	Stationäre Phasen	Autoren	Jahr	Literatur
$(F_3C)_2CF\text{-}O\text{-}(CH_2)_3\text{-}Si(CH_3)_2\text{-}Cl$				Bartle, Novotny	1974	234
Trimethylchlorsilan	300		OV 1, OV 101	Welsch	1977	235
Dimethyldichlorsilan	300		Squalan	Engelwald		
Hexamethyldisilazan	100, 130, 300		UCON 550 LB	Klauske		
Hexamethyldisilazan + Trimethylchlorsilan	300					
	150					
Tetraphenyldimethyldisilazan						
Hexamethyldisilazan Diphenyltetramethyldisilazan	400	Pyrexglas mit wässriger Salzsäure behandelt und dehydratisiert	SE 30, SE 52	Grob	1979	222
Zersetzungsprodukten von Polysiloxanen	350 - 450	Alkaliglas, HCl, H_2O, HF-behandelt und HCl - geleacht	SE 30, OV 1, OV 101 OV 17, SE 52, SE 54, Dexsil 400	Schomburg, Husmann, Borwitzky	1979	109
Silyl-8 Gemisch aus $(H_5C_2)_2N\text{-}Si(CH_3)_3$, $H_3C\text{-}C(OSi(CH_3)_3)=N\text{-}Si(CH_3)_3$, $(H_3C)_3Si\text{-}NH\text{-}Si(CH_3)_3$	300 - 350	Alkaliglas mit 1 % wässr. HF gespült, mit 20 % HCl bei 160 °C geleacht	OV 225	Badings Wassink	1980	236

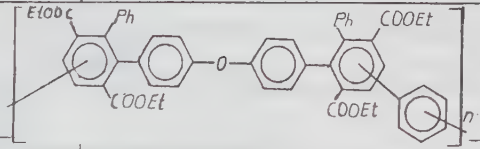
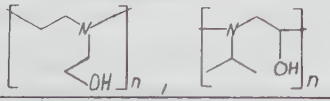
Tabelle 6, Fortsetzung: Silylierung von Glaskapillaren

Silylierungsmittel	T [°C]	Vorbehandlung d. Glaskapillaren	Stationäre Phasen	Autoren	Jahr	Literatur
$(H_3C)_3Si\text{-}\overset{H}{N}\text{-}Si(CH_3)_3$ $(PhH_2C_3)Si\text{-}\overset{H}{N}\text{-}Si(CH_2Ph)_3$ $(Ph_2HC)_3Si\text{-}\overset{H}{N}\text{-}Si(CHPh_2)$ Ph_3SiNH_2	400	siehe Lit. 370, 372	Polaritätsbereich von OV 1 bis OV 225	Grob	1980	237
Hexamethyldisilazan / Trimethylchlorsilan (5:1)	200	Alkaliglass 2 h bei 400 °C geätzt	Dexsil 400	Maskarinec Oelrich	1980	238
F_3C (O $Si(CH_3)_3$, N $Si(CH_3)_3$) Trimethylchlorsilan 99 : 1	200					
$(H_3C)_3Si\text{-}N$ (CH = N, CH · CH)	200					
thermische Zersetzung von stat. Flüssigkeiten	400	verschieden modifiziertes Alkaliglas "fused silica"	OV 101, CW 20 M	Schomburg Husmann Behlau	1980	239
Hexamethyldisilazan Hexamethyldisiloxan	400	mit wässriger HCl behandeltes Alkaliglas Borsilikatglas	OV 1, SE 52	Verzele et al.	1980	240

Tabelle 7: Nicht - siliciumhaltige Desaktivierungs- und Benetzungsmittel in der Kapillar - GC

Substanz Handelsname	chemische Bezeichnung	T_{max}	stationäre Phase	G.K.	Autor	Jahr	Lit.
Diasyl L Alkaterge T Atlas Span 80 DC Antifoam A	n-Lauryliminodiessigsäure kationisches, hochmolekulares Amin	170[x]	Squalan Squalan	- -	Averill	1961	241
Igepal CO 886	Nonylphenoxypolyäthoxyäthanol	170[x]			Averill	1965	242
Gas Quat L	Trioktadecylammoniumbromid	200[x]	SF96, Apiezon L Polyphenyläther, CW 20 M	+	Metcalf Martin	1967	243
	Polybutadien Polytrifluorchloräthylen	200 ca. 200	Apiezon N Apiezon N, UCON	+ +	Grob	1968	244
BTPPC	Benzyltriphenylphosphoniumchlorid	320[x]	OV 7		Malec	1971	245
BTPPC Kalignost	Benzyltriphenylphosphoniumchlorid Natriumtetraphenylborat		SE 30, OV 101	+	Rutten Lluyten	1972	180
Carbowax	thermisch behandeltes Polyäthylenglykol		CW 20 M	+	Cronin	1974	229
Carbowax	Polyäthylenglycol		12 verschiedene Phasen	+	Schomburg	1974	62

Tabelle 7, Fortsetzung: Nicht - siliciumhaltige Desaktivierungs- und Benetzungsmittel in der Kapillar - GC

Substanz Handelsname	chemische Bezeichnung	T_{max}	stat. Phasen	G.K.	Autor	Jahr	Lit.
	(Di-iso-butylphenoxyäthoxyäthyl) dimethyl-benzyl-ammoniumchlorid				Kaiser	1975	246
Carbowax Emulphor	thermisch behandeltes Polyäthylenglycol " ",verätherte "		16 verschiedene Phasen	+	Grob	1976	197
Poly - A 103	Polyamid		Apiezon L	+	Schulte	1976	196
			UCON LB 550 x	+	Gordon Taylor Harris	1976	247
Carbowax 20 M	im Einspritzblock erzeugte Zersetzungsprodukte von thermisch behandeltem Polyäthylenglykol	250	SE 30	+	Franken et al.	1977	248
	Tri-äthanolamin 	250	14 verschiedene Phasen	+	Sandra Verzele	1977	227
Superox - 4 Emulphor	Polyäthylenglykol, MG 4×10^6 verätherte Polyäthylenglykol	280	SE 54, SP 2250	+	Arrendale Smith, Rogers	1980	249

x) nach Vergleichsmessungen von Malec +) G.K. -) keine G.K.

Anhang II

Tabellen und Abbildungen zu Kapitel 5

Tabellen 10 - 70

Abbildungen 7 - 63

Tabelle 10: Trennvermögen von einigen verwendeten Glaskapillarsäulen

Säulen Nr.	Stat. Phase	Vorbehandlung	Belegung	Länge [m]	$\frac{n_{theo.}}{m}$	k'	coating efficiency [%]	TZ	k'_2	
	Dimethylpolysiloxane									
B 1121 a	SE 30	Alkali, HCl, H_2O	statisch	23	3040	19,22	76	36	19,22	
B 1121 b	SE 30	Alkali, HCl, H_2O	statisch	24	3800	17,90	95	36	17,90	
B 1121 c	SE 30	Alkali, HCl, H_2O	statisch	25	3300	8,59	79	37	8,59	
B 1121 e	SE 30	Alkali, HCl, H_2O	statisch	25	3840	8,36	92	--	----	
B 1069 b	SE 30	Alkali, HCl, H_2O	statisch	28	3290	4,64	74	33	4,64	
B 1069 c	SE 30	Alkali, HCl, H_2O	statisch	25	1980	9,95	48	31	9,95	
B 1069 d	SE 30	Alkali, HCl, H_2O	statisch	22	4140	18,25	103	40	18,25	
B 1171 c	SE 30	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	30	4000	19,80	101	47	19,80	
B 1171 c	SE 30	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	30	3640	19,56	91	45	19,56	n. Ausheizen
B 1171 d	SE 30	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	11	2980	28,94	75	24	29,38	
B 1171 d	SE 30	Alkali, HCl, H_2, HF	statisch	11	2770	29,38	70	23	29,38	n. Ausheizen
H 923	OV 101	Alkali, HCl, HF, EMO	dynamisch	80	3030	8,47	72	67	16,15	
H 695 a	OV 101	Alkali, HCl, CW 20M	dynamisch	110	2260	12,15	55	45	12,15	
B 1186	OV 101	Alkali, HCl, H_2O, HF	dynamisch	150	2150	32,03	54	77	32,03	
B 1036 b	OV 101	Alkali, HCl, HF	dynamisch	47	2320	13,39	57	43	13,39	2.Belegung
B 1049 a	OV 101	Alkali, HCl, H_2O, HF	dynamisch	49	2900	4,97	66	44	4,97	v. Ausheizen
B 1049 a	OV 101	Alkali, HCl, H_2O, HF	dynamisch	49	1870	10,24	45	39	10,24	n. Ausheizen
B 18 b	OV 101	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	25	2300	19,06	57	33	19,06	
B 18 c	OV 101	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	25	3640	17,32	90	40	17,32	

Tabelle 10, Fortsetzung: Trennvermögen von einigen verwendeten Glaskapillarsäulen

Säulen Nr.	Stationäre Phase	Vorbehandlung	Belegung	Länge [m]	$\frac{n_{theo}}{k'}$	k'	coating efficiency [%]	TZ	k'_2	
	Methyl-Phenylpolysiloxane									
B 1292 a	SE 52	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	50	3180	15,44	79	54	15,44	
B 20 a	SE 54	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	45	2720	15,90	67	41	15,19	
B 20 b	SE 54	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	35	3270	8,69	78	38	8,69	v. Ausheizen
B 20 b	SE 54	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	35	2990	7,76	71	37	7,76	n. Ausheizen
B 1095	SE 54	Duran, thermisch	dynamisch	45	1750	8,20	42	--	----	
B 5	SE 54	Duran, thermisch	dynamisch	48	2150	12,0	52	--	----	
B 4	SE 54	Duran, thermisch	dynamisch	45	1860	11,0	45	--	----	
B 1036	SE 54	Alkali, HCl, HF, therm.	dynamisch	45	1530	10,5	37	--	----	
H 946 b	OV 7	Alkali, HCl, HF	dynamisch	30	2860	10,2	69	--	----	
H 946 a	OV 61	Alkali, HCl, HF	dynamisch	30	2000	16,1	49	--	----	
B 1183 b	OV 22	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	30	1240	12,74	30	24	12,74	
B 1144 d	OV 25	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	20	2630	9,34	66	--	----	

H = Säulenherstellung Husmann; B = Säulenherstellung Borwitzky; TZ = Trennzahl

k' = Kapazitätsverhältnis des zweiten, zur Trennzahlbestimmung verwendeten n-Alkans

Tabelle 10, Fortsetzung: Trennvermögen von einigen verwendeten Glaskapillarsäulen

Säulen Nr.	Stationäre Phase	Vorbehandlung	Belegung	Länge [m]	$\frac{n_{theo}}{m}$	k'	coating efficiency %	TZ	k'/2
Carboranpolysiloxane									
B 1159	Dexsil 300	Alkali, HCl, H_2O, HF 5 x 1 % BTPPC	dynamisch	150	2050	21,37	51	78	21,37
B 1171 a	Dexsil 300	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	10	3870	23,22	97	27	23,32
B 18 d	Dexsil 300	Alkali, HCl, H_2O, HF desaktiviert mit Polyamid A 101	statisch	34	3240	6,44	75,5	41	6,44
B 1304 a	Dexsil 300	Alkali, HCl, H_2O, HF desaktiviert mit Hexamethyldisilazan	statisch	30	1740	5,88	40	31	22,29
B 1292	Dexsil 300	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	30	1700	10,09	41	32	10,09
B 1304 b	Dexsil 400	Alkali, HCl, H_2O, HF thermisch	statisch	50	3250	7	79	53	10,35
B 1144 a	Dexsil 400	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	30	3240	4,22	72	--	----
B 1144 b	Dexsil 410	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	26	3130	7,77	74	36	7,77
B 1171 b	Dexsil 400	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	12	3240	7.79	77	25	7,79
Sonstige Phasen									
B 1121 c	$C_{87}H_{176}$	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	25	2360	3,17	50	--	----
B 1231 a1	Superox-4	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	22	2750	5,23	63	--	----
B 1183 a2	PPE 20	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	27	2040	8,84	49	--	----
B 1199 b	Poly S 179	Alkali, HCl, HF	dynamisch	30	1940	53,6	49	--	----
B 1188 c	BBBT	Duran, HF	statisch	13	1380	71,2	39	--	----
B 1144 e	BBBT	Alkali, HCl, H_2O, HF	statisch	9	1180	65,6	30	--	----

Tabelle 11: hetp - Werte in Abhängigkeit von der Trägergasgeschwindigkeit u

Säule : 27 m, i.D. 0,27 mm
Stationäre Phase : Marlophen
"solute" : n - Dodekan

Trägergas = Stickstoff		Trägergas = Helium		Trägergas = Wasserstoff	
u [m/sec]	hetp [mm]	u [m/sec]	hetp [mm]	u [m/sec]	hetp [mm]
0,057	0,319	0,0513	0,799	0,153	0,332
0,082	0,284	0,0728	0,684	0,237	0,284
0,098	0,273	0,0977	0,534	0,294	0,279
0,130	0,308	0,212	0,360	0,376	0,281
0,138	0,274	0,226	0,345	0,411	0,284
0,181	0,307	0,345	0,418	0,655	0,378
0,270	0,424	0,395	0,448		
0,367	0,586	0,467	0,504		
0,479	0,806	0,498	0,523		
		0,573	0,526		

Abbildung 9: Abhängigkeit der Bodenzahlen einer 150 m langen Glaskapillarsäule vom Kapazitätsverhältnis k'

Säule : 150 m Alkaliglas, HCl-, H_2O-, HF-behandelt
Stat. Phase: OV 101 (Dimethylpolysiloxan)
Temperatur : 80 °C
Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

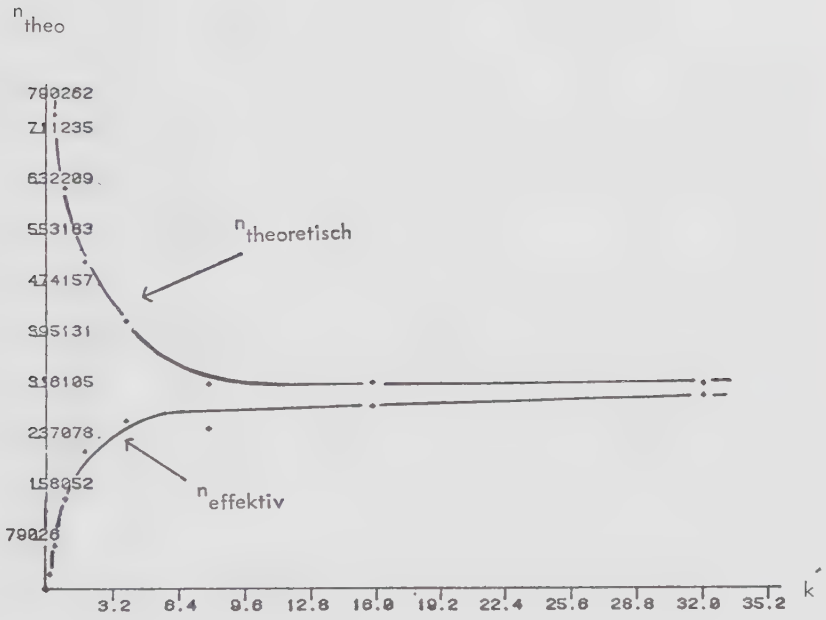


Tabelle 12:

Anzahl der gemessenen theoretischen und effektiven Böden einer 150 m langen Kapillarsäule in Abhängigkeit vom Kapazitätsverhältnis k'

Graphische Darstellung siehe Abbildung 9

Messbedingungen: Säule : 150 m, i. D. 0,27 mm
Stat. Phase : OV 101 (Dimethylpolysiloxan)
Temperatur : 80 °C
Trägergas : Wasserstoff, 0,36 m/sec

k'	n_{theo}	n_{eff}
0,21	790 000	24 400
0,44	739 000	69 400
0,91	625 000	142 000
1,87	510 000	216 000
3,82	419 000	263 000
7,80	320 000	252 000
15,82	323 000	286 000
32,05	322 000	303 000

Abbildung 7:

Einfluß des Trägergases auf die Elutionstemperatur von Steinkohlenteerkomponenten

7a: Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec. bei 290 °C
Säule : 45 m Borsilikatglas, i.D. 0,27 mm
Phase : SE 54
Temp. : 80 - 290 °C, 2 °C/min.

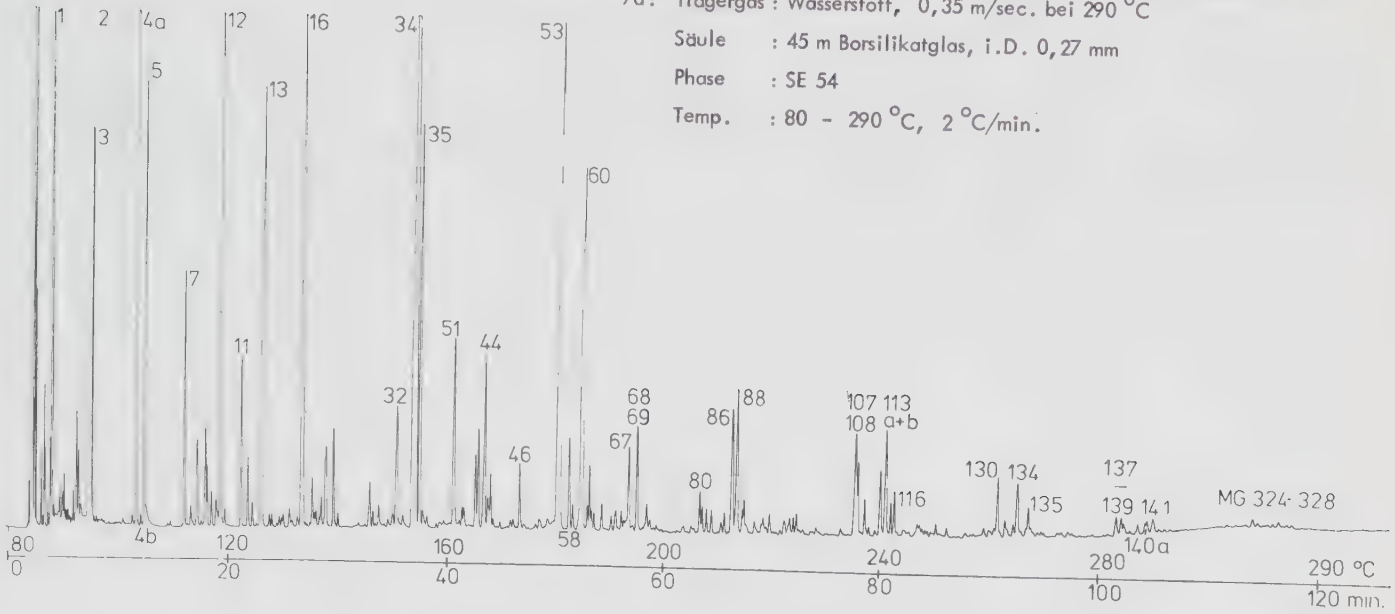


Abbildung 7 :

Einfluß des Trägergases auf die Elutionstemperatur von Steinkohlenteerkomponenten

7b : Trägergas : Stickstoff, 0,12 m/sec. bei 290 °C

Säule : 45 m Borsilikatglas, i.D. 0,27 mm

Phase : SE 54

Temp. : 80 - 290 °C, 2 °C/min.

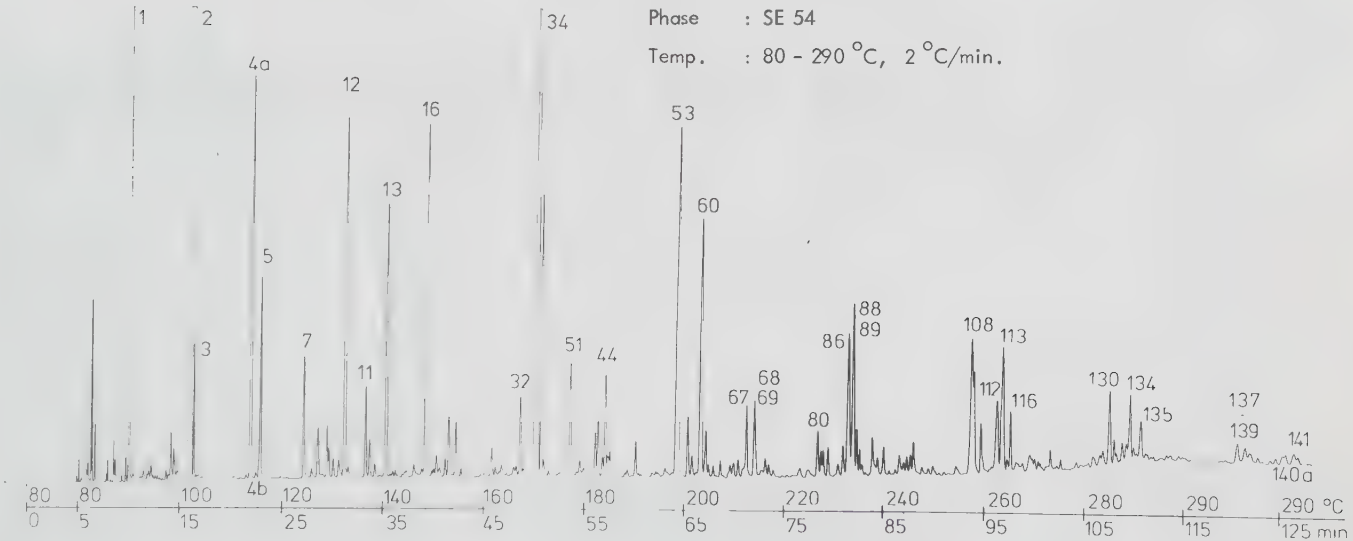


Abbildung 10: Trennzahlen TZ von Glaskapillarsäulen verschiedener Länge in Abhängigkeit vom Kapzitätsverhältnis k' des jeweils höheren von zwei unmittelbar aufeinanderfolgenden n-Alkanen zwischen denen die Trennzahl bestimmt wurde

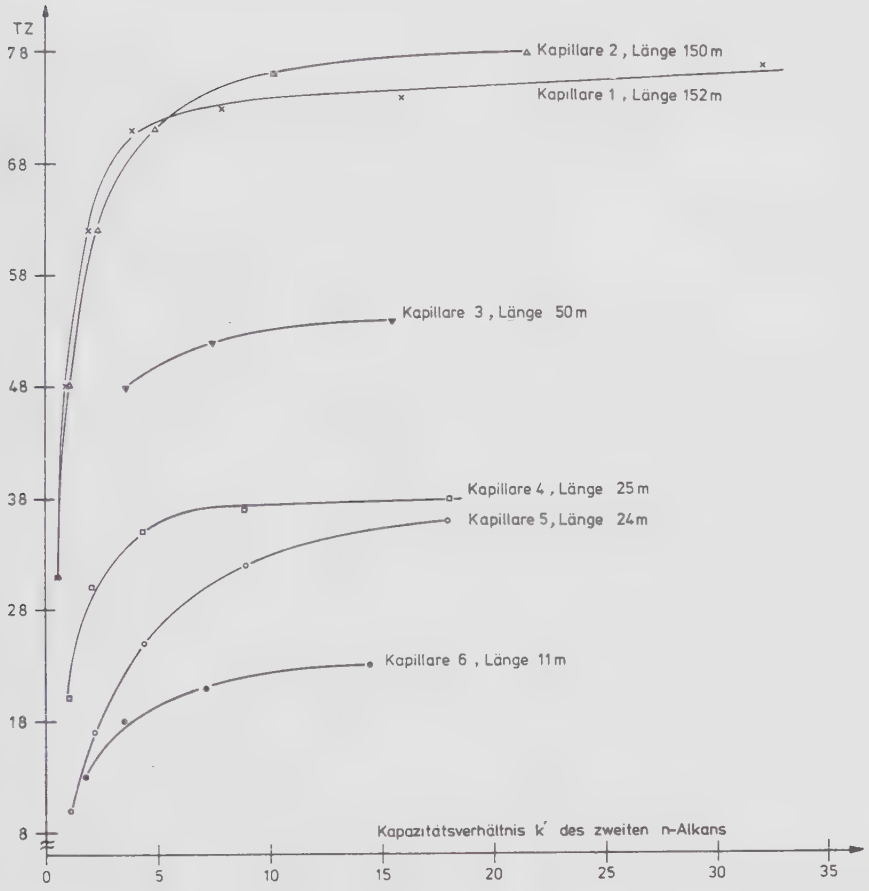


Tabelle 13:

Trennzahlen TZ zwischen unmittelbar aufeinanderfolgenden n-Alkanen in Abhängigkeit vom Kapazitätsverhältnis des jeweils zweiten Homologen, gemessen auf Kapillarsäulen verschiedener Länge

gemeinsame Bedingungen für alle Kapillarsäulen:
innerer Durchmesser : 0,27 mm
Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec
Temperatur : 80 °C

Kapillare 1			Kapillare 2			Kapillare 3		
Länge : 152 m			Länge : 150 m			Länge : 50 m		
Stat. Flüssigkeit : OV 101			Stat. Flüssigkeit : Dexsil 300			Stat. Flüssigkeit : SE 52		
Filmdicke : 54 nm			Filmdicke : 135 nm			Filmdicke : 260 nm		
k'	n-Alkan	TZ	k'	n-Alkan	TZ	k'	n-Alkan	TZ
0.21	C- 8		0.24	C- 8		0.37	C- 7	
		31			31			
0.44	C- 9		0.51	C- 9		1.67	C- 9	
		48			48			48
0.91	C-10		1.09	C-10		3.51	C-10	
		62			62			52
1.87	C-11		2.30	C-11		7.39	C-11	
		71			71			54
3.82	C-12		4.85	C-12		15.44	C-12	
		73			76			
7.80	C-13		10.20	C-13				
		74						
15.82	C-14				78			
		77	21.37	C-14				
32.03	C-15							

Tabelle 13, Fortsetzung :

Trennzahlen TZ zwischen unmittelbar aufeinanderfolgenden n-Alkanen in Abhängigkeit vom Kapazitätsverhältnis k' des jeweils zweiten Homologen, gemessen auf Kapillarsäulen verschiedener Länge

gemeinsame Bedingungen für alle Kapillarsäulen :

innerer Durchmesser : 0,27 mm

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

Temperatur : 80 °C

Kapillare 4			Kapillare 5			Kapillare 6		
Länge : 25 m			Länge : 24 m			Länge : 11 m		
Stat. Flüssigkeit : SE 30			Stat. Flüssigkeit : SE 30			Stat. Flüssigkeit : SE 30		
Filmdicke : 190 nm			Filmdicke : 95 nm			Filmdicke :		
k'	n-Alkan	TZ	k'	n-Alkan	TZ	k'	n-Alkan	TZ
0.52	C- 8		0.52	C- 9		0.85	C-10	
		20			10			13
1.03	C- 9		1.07	C-10		1.73	C-11	
		30			17			18
2.11	C-10		2.18	C-11		3.51	C-12	
		35			25			21
4.32	C-11		4.42	C-12		7.11	C-13	
		37			32			23
8.81	C-12		8.90	C-13		14.30	C-14	
		38			36			24
18.0	C-13		17.90	C-14		28.94	C-15	

Tabelle 14:

Trennzahlen TZ in Abhängigkeit von der Quadratwurzel der effektiven Bodenzahlen des jeweils zweiten homologen n-Alkans

Säulen Nr.	i.D. [mm]	Länge [m]	Phase	n_{eff} "	TZ exper	k "	TZ berechnet	$\sqrt{n_{eff}}$
B 1183 b_1	0,27	30	Dexsil 410	60900	37	12,68	33,5	246,8
H 828	0,27	30	Apiezon L	70500	40	7,14	36,2	265,5
B 1183 A_2	0, 27	27	PPE 20	50300	23	15,10	30,3	224,3
B 1171 c	0,27	30	SE 30	109800	47	19,80	45,7	331,4
B 1095	0,27	45	SE 54	60700	35	4,20	33,5	246,4
B 18 d	0,27	37	Dexsil 300	66600	38	6,47	35,2	258,1
B 18 c	0,27	25	OV 101	81400	40	17,32	39,1	285,3
B 18 b	0,27	25	OV 101	52000	33	19,06	30,8	228,0
B 1069 d	0,27	22	SE 30	81800	40	18,25	39,2	286,0
B 1069 b	0,27	28	SE 30	62400	28	4,64	34,0	249,8
B 1049 a	0,27	49	OV 101	76000	39	10,24	37,7	275,7
B 1036 b	0,27	47	OV 101	94300	43	13,69	42,2	307,1
B 1144 a	0,27	31	Dexsil 400	90700	34	41,77	41,3	301,2
B 1121 b	0,27	24	SE 30	81900	36	17,90	39,2	286,2
B 1121 c	0,27	25	SE 30	74200	37	14,24	37,2	272,4
B 1121 a	0,27	23	SE 30	69500	37	39,46	35,9	263,6
B 20 b	0,27	35	SE 54	92100	38	8,69	41,7	303,5
B 20 a	0,27	45	SE 54	107900	41	15,19	45,3	328,5
B 1171 D	0,27	11	SE 30	30600	24	28,94	23,2	174,9
B 1171 B	0,27	12	Dexsil 400	30500	25	7,79	23,2	174,6
B 1171 A	0,27	10	Dexsil 300	35600	27	23,32	25,2	188,7
B 1186	0,27	155	OV 101	302600	77	32,03	77,0	550,1
B 1159	0,27	150	Dexsil 300	180600	78	21,37	74,2	529,7
H 695 a	0,27	110	OV 101	210200	45	19,04	63,9	458,5
H 923	0,27	80	OV 101	221370	65	31,9	65,6	470,5
Desty	0,152	270	Squalan	785000	133		125,2	886,0
Badings 1	0,95	98	CW 20 M	56160	34	5,38	32,1	237,0
Badings 2	0,80	90	CW 400	60200	31	8,60	33,3	245,4
Badings 3	0,80	93	UCON HB5100	79920	42	20,27	38,7	282,7
Badings 4	0,8	149	SE 30	145300	53	8,60	52,8	381,2
Badings 5	0,8	31	Apiezon L	27110	29	14,43	21,8	164,7
Badings 6	0,95	30	SE 30	18970	23	4,66	17,9	137,8

Abbildung 12: Verbesserung der Trennung von komplexen Gemischen durch Verwendung von Kapillarsäulen mit höheren Bodenzahlen

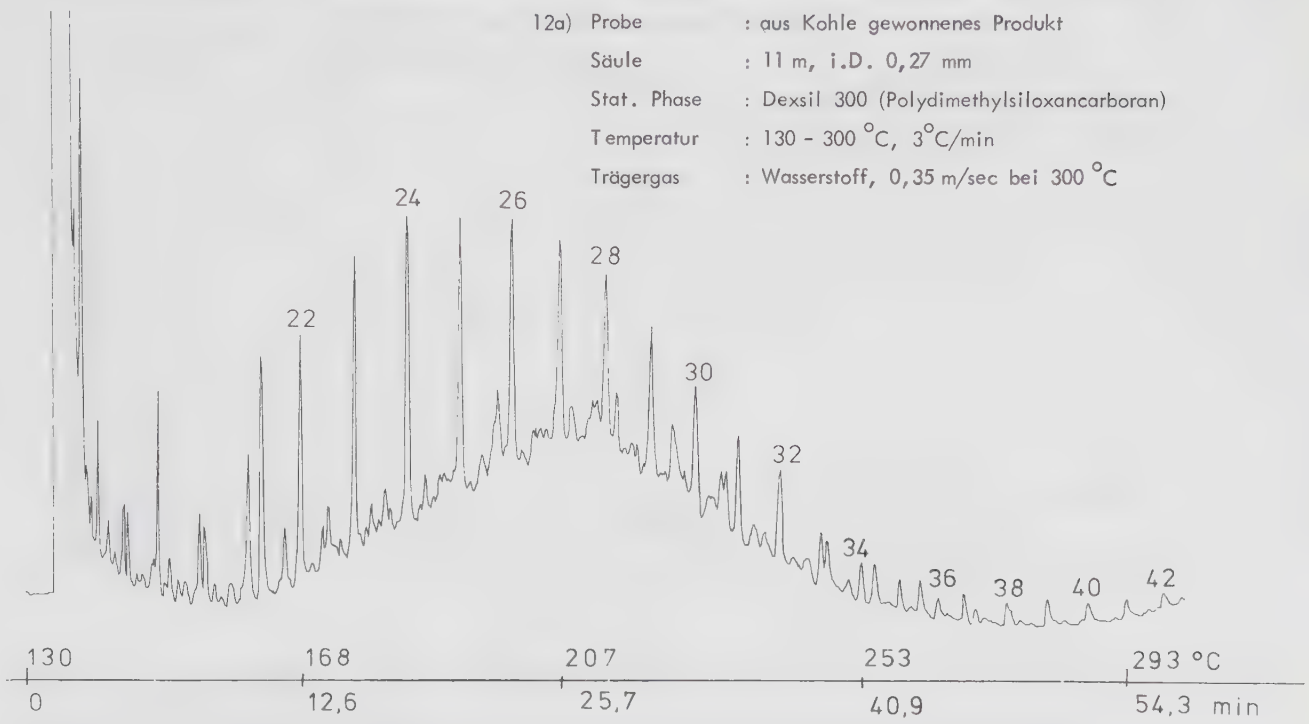


Abbildung 12: Verbesserung der Trennung von komplexen Gemischen durch Verwendung von Kapillarsäulen mit höheren Bodenzahlen

12 b) Probe : aus Kohle gewonnenes Produkt
Säule : 45 m, i.D. 0,27 mm
Stat. Phase : SE 54 (Methyl-/Phenyl-/Vinylpolysiloxan)
Temperatur : 70 - 290 °C, 2 °C/min
Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec bei 290 °C

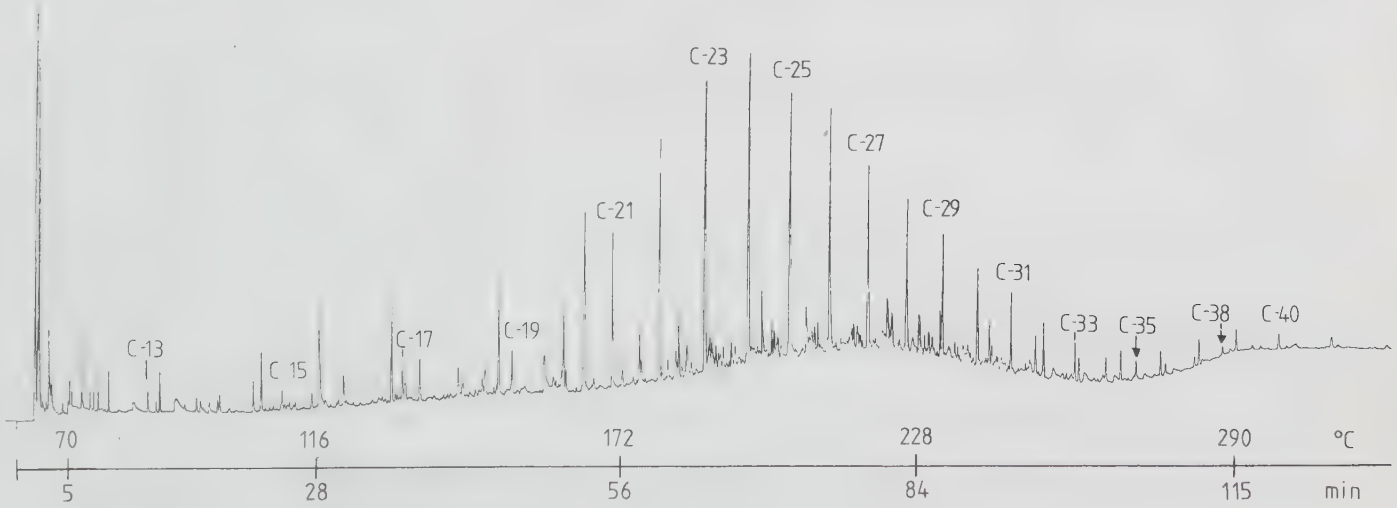


Abbildung 13: Grenzen des Trennvermögens von sehr langen Glaskapillarsäulen

13a)

Probe	:	Oligomerisationsprodukt von Ethen (Abbildung 13a Gesamtübersicht)
Säule	:	150 m, i.D. 0,27 mm
Stat. Phase	:	OV 101 (Dimethylpolysiloxan)
Trägergas	:	Wasserstoff, 0,4 m/sec bei 54 °C
Temperatur	:	54 - 220 °C, 1 °C/min, 5 min. isothermer Vorlauf
n_{theo}	:	300 000 (siehe Abbildung 9)

Abbildung 13 : Grenzen des Trennvermögens von sehr langen Glaskapillarsäulen

13 b) : Oligomerisationsprodukt von Ethen (Abbildung 13 b: Teilausschnitt des leicht flüchtigen Bereichs)

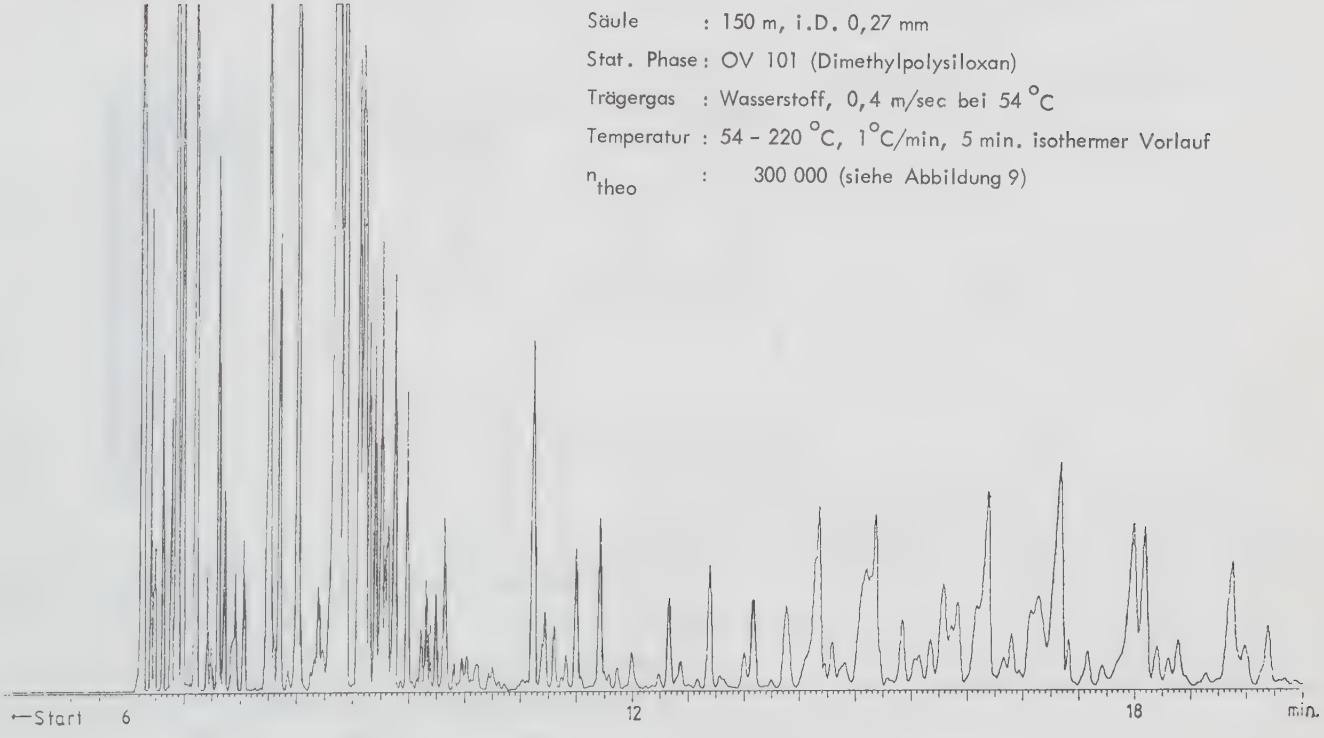


Abbildung 14 a

Tabakrauchkondensat, apolare Fraktion, niedrigsiedender Bereich

Säule : 146 m, i.D. 0,27 mm

stat. Phase : Polynitrilsiloxan OV 225

Temperatur : 60 - 200 °C, 0,9 °C/min

Trägergas : Wasserstoff, 0,46 m/sec bei 60 °C

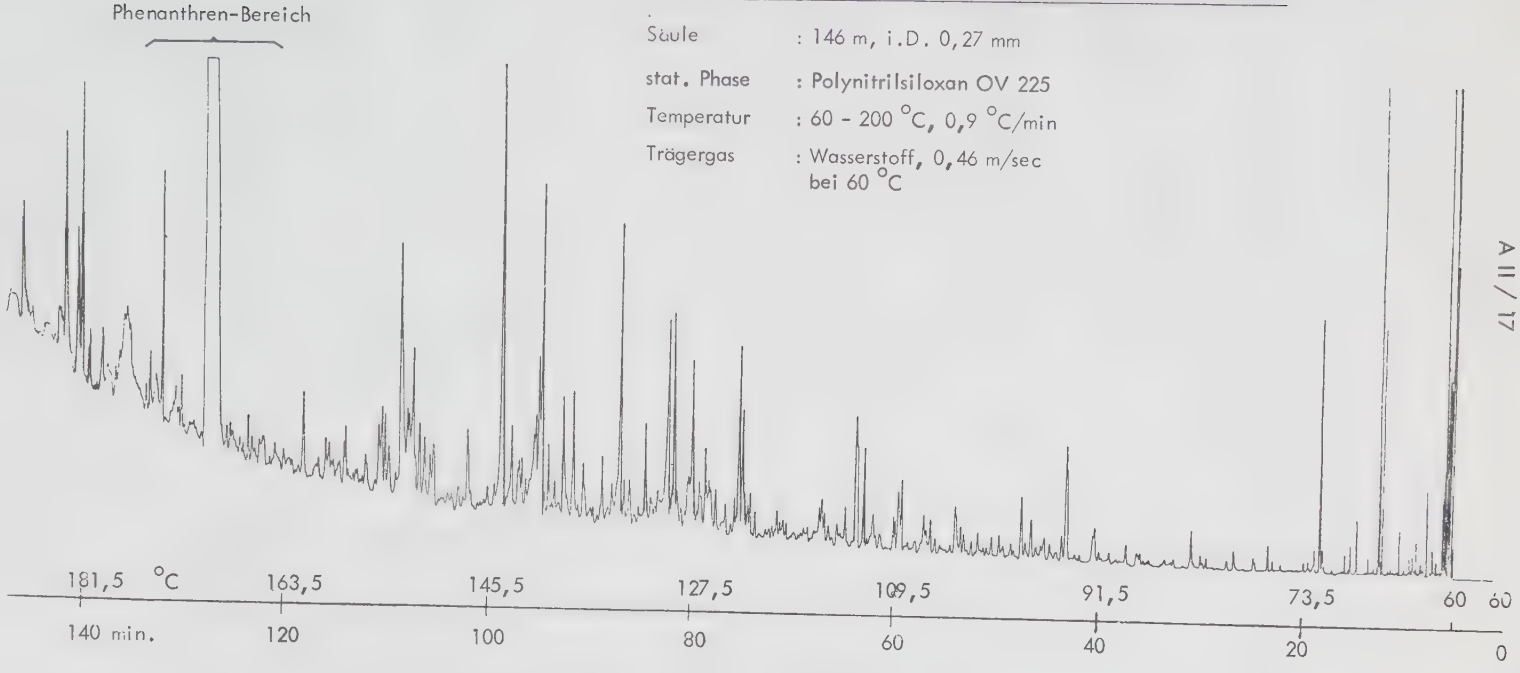


Abbildung 14 b:

Probe	: Tabakrauchkondensat, apolare Fraktion, hochsiedender Bereich
Säule	: 30 m, i.D. 0,27 mm
Stat. Phase	: OV 7 (Methyl-/Phenylpolysiloxan)
Temperatur	: 140 - 290 °C, 2°C/min
Trägergas	: Wasserstoff, 0,35 m/sec

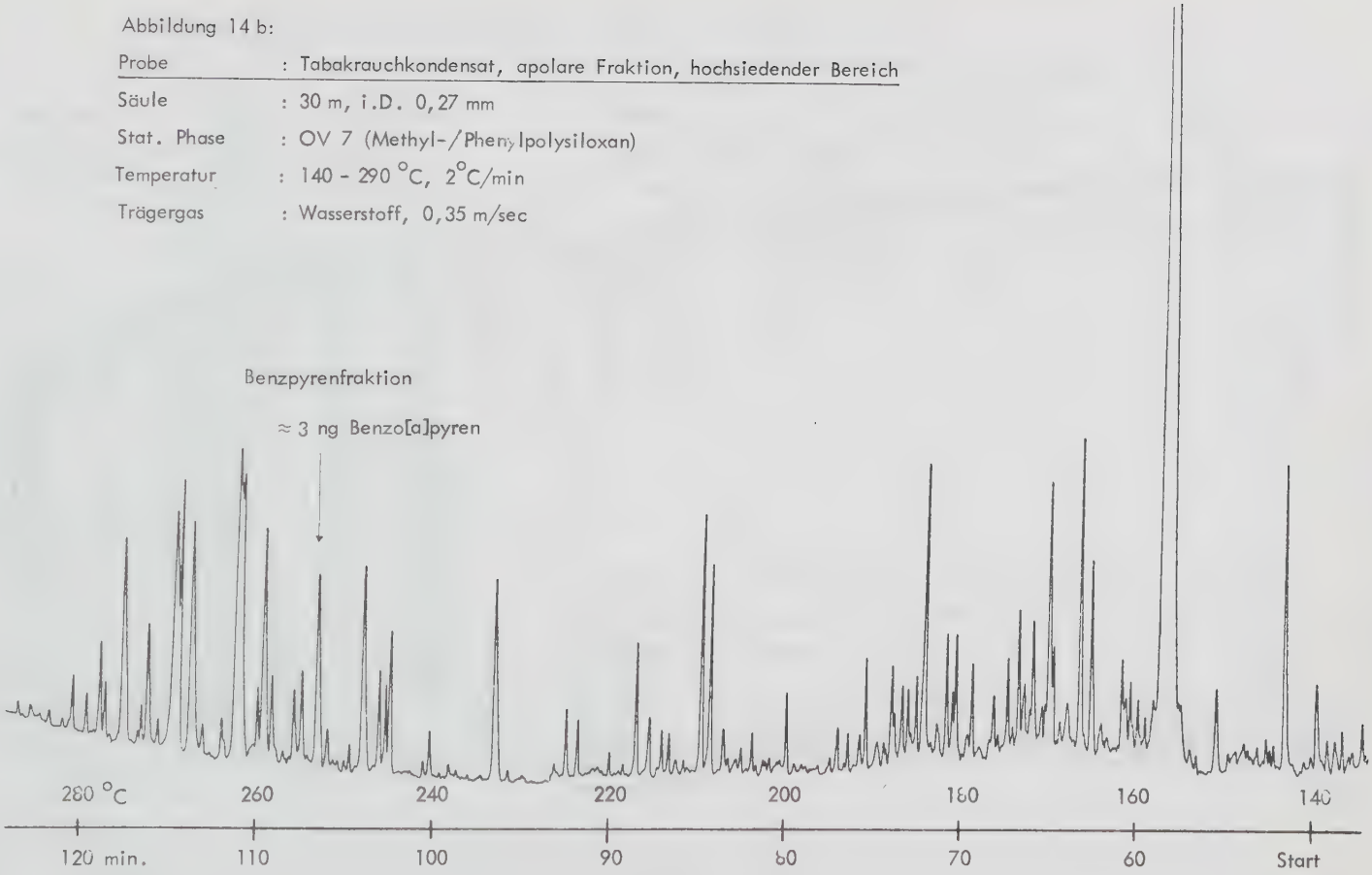


Abbildung 15:

Trennzahl TZ als Auflösungsgrösse im Temperaturprogramm bei verschiedenen Aufheizraten

Säule : 45 m OV101 , i.D. 0.27 mm
Temperaturbereich : 105-280°C
Trägergas : 0,8 bar Stickstoff

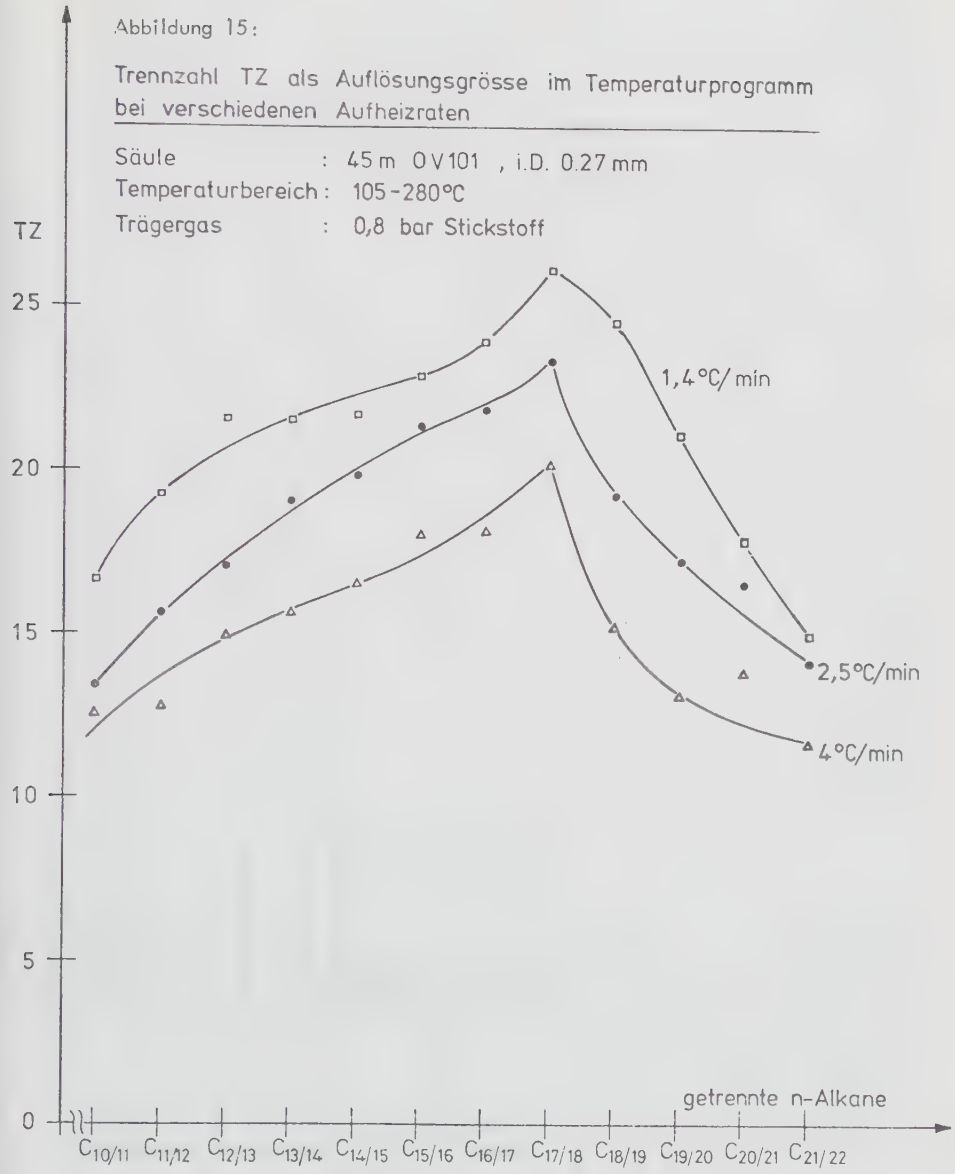


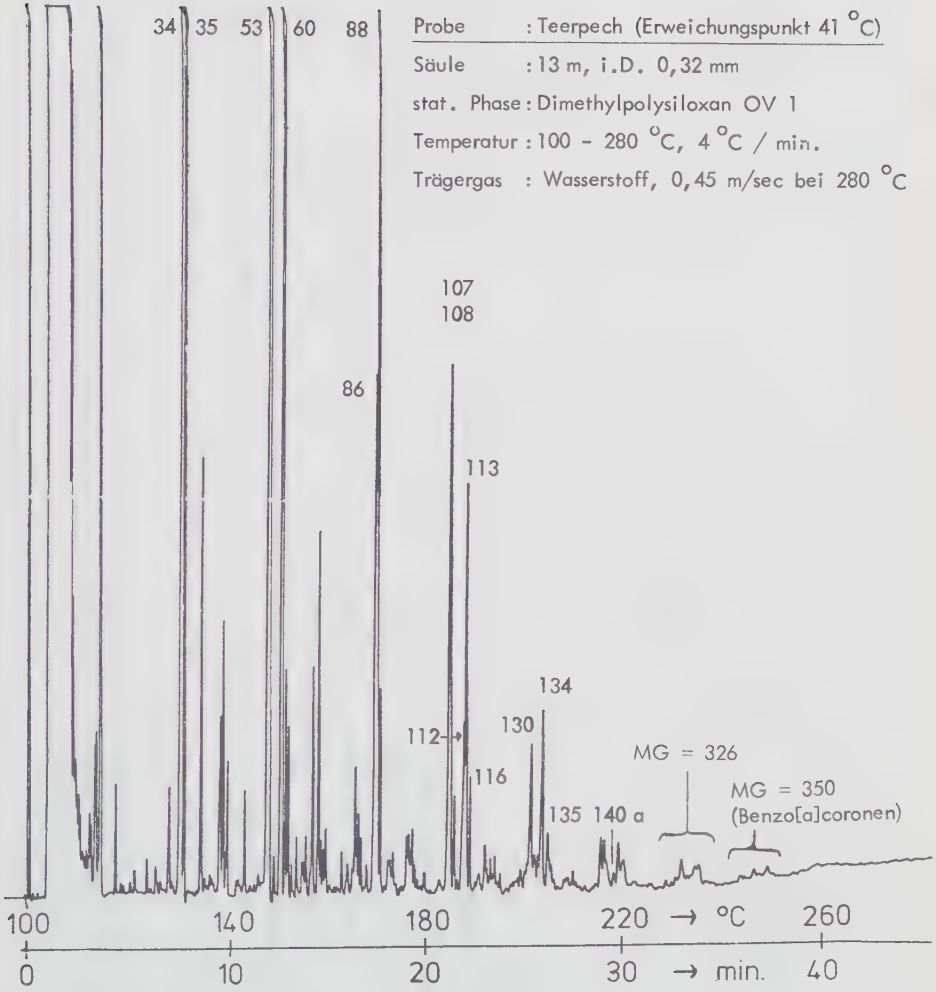
Tabelle 15:

Trennzahl TZ als Auflösungsgröße im Temperaturprogramm bei verschiedenen Aufheizungsraten.

Säule : 45 m Dimethylpolysiloxan OV 101; i.D. 0,27 mm
Temperaturbereich : 105 - 280 °C
Trägergas : Stickstoff, 0,8 bar

Getrennte n-Alkane	1,4 °C/min. TZ	2,5 °C/min. TZ	4 °C/min. TZ
C_{10}/C_{11}	16,6	13,4	12,5
C_{11}/C_{12}	19,2	15,6	12,7
C_{12}/C_{13}	21,6	17,0	14,9
C_{13}/C_{14}	21,5	19,0	15,6
C_{14}/C_{15}	21,7	19,8	16,5
C_{15}/C_{16}	22,9	21,3	16,0
C_{16}/C_{17}	23,9	21,8	18,1
C_{17}/C_{18}	26,1	23,3	20,1
C_{18}/C_{19}	24,5	19,2	15,2
C_{19}/C_{20}	21,1	17,2	13,1
C_{20}/C_{21}	17,8	16,5	13,8
C_{21}/C_{22}	14,9	14,1	11,6

Abbildung 16:



Probe : Teerpech (Erweichungspunkt 41 °C)

Säule : 13 m, i.D. 0,32 mm

stat. Phase : Dimethylpolysiloxan OV 1

Temperatur : 100 - 280 °C, 4 °C / min.

Trägergas : Wasserstoff, 0,45 m/sec bei 280 °C

Tabelle 16 a: Durch Ätzung mit gasförmigem Chlorwasserstoff an der Innenoberfläche von Alkaliglaskapillaren gebildete Mengen an Metallionen.

Eigene Untersuchungen [109] : Kapillarlänge 150 m X 0,27 mm I.D.
Glassorte Schott AR

Säulen-Nr.	Ätzung:	Temperatur [°C]	Zeit [h]	Na^+ [mg/m^2]	Ca^{2+} [mg/m^2]	Bemerkungen
9 Säulen Mittelwert	dynamisch, Durchfluß	450	4	116 ± 21	3,5 ± 0,3	
B 1292	dynamisch, Durchfluß	450	4	112	3,5	1. Ätzung
B 1292	dynamisch, Durchfluß	450	4	3.1	≥ 0,08	2. Ätzung ×
B 1332	statisch, geschlossen	450	4	53	nicht gemessen	1. Ätzung
B 1332	statisch, geschlossen	450	4	30	4,7	2. Ätzung ×
B 1332	dynamisch, Durchfluß	450	4	49	1,6	3. Ätzung ×
B 1383	statisch, geschlossen	350	2	16	≥ 0,8	

Ferner wurden Spuren an Mg^{2+}, Al^{3+} und Co^{2+} gefunden, die in niedrigen Konzentrationen im Alkaliglas vorhanden sind.

× Die zweiten und dritten Ätzungen wurden durchgeführt, nachdem die zuvor gebildeten Chloride durch Spülen mit Wasser entfernt und die Kapillare im Inertgasstrom bei 350 °C getrocknet worden waren.

Tabelle 16b: Durch Ätzung mit gasförmigem Chlorwasserstoff an der Innenoberfläche von Alkaliglaskapillaren gebildete Mengan an Metallionen.

Untersuchungen anderer Autoren

J. J. Franken et al. [195] : verwendete Glassorten: Schott AR, Philips Röntgenglas 06, Choisy-le-roi Verre Sodacalcique B44

Säulen-Nr.	Ätzung	Temperatur [°C]	Zeit [h]	Na^+ [mg / m^2]	Ca^{2+} [mg / m^2]	Bemerkungen
a	dynamisch, Durchfluß	350	2	39	nur Spuren	Kapillar-I.D.0,25 mm
b	statisch, geschlossen	300	1,5	52	nur Spuren	Kapillar-I.D.0,25 mm
c	statisch, geschlossen	350	1,5	59	nur Spuren	Kapillar-I.D.0,25 mm
d	statisch, geschlossen	350	2	111	nur Spuren	Kapillar-I.D.0,5 mm
J.L. Marshall und D.A. Parker [210] : Glassorte Chance PWM						
1	statisch, geschlossen	350	3	104	nicht gemessen	Kapillare: 50 m x 0.4 mm
2	statisch, geschlossen	350	3	85	nicht gemessen	Kapillare: 8,7 m x 0,4 mm
3	statisch, geschlossen	350	2 x 3	122	nicht gemessen	Kapillare: 8,6 m x 0,4 mm

Tabelle 16c: Zusammensetzung der zur Kapillarenherstellung verwendeten Alkaligläser (Herstellerangaben)

	Marshall, Parker [210]	Franken et al. [195]			Eigene Versuche [109]
Komponente	Chance PWM	Choisy-le-roi Verre sodacalcique B 44	Philips Röntgenglas 06	Schott AR	Schott AR
SiO_2	71,4 %	70,2 %	70 %	67 %	67 %
Na_2O	15,0 %	12,6 %	17,8 %	15 %	15 %
K_2O	1,7 %				
CaO	4,6 %	6,0 %	8,8 %	7 %	7 %
ZnO			0,5 %	7 %	7 %
Al_2O_3	2,2 %	}	2,3 %	2,5 %	2,5 %
Fe_2O_3		} 4,2 %			
B_2O_3		1,0 %			
MgO	4,0 %	1,9 %			
BaO	0,8 %	3,8 %			
MnO			0,6 %		
SO_3	0,2 %				

Abbildung 17b: Einfluß von verschiedenen Glasoberflächen auf das „Bluten" von Dimethylpolysiloxanphasen bei ansteigenden Temperaturen

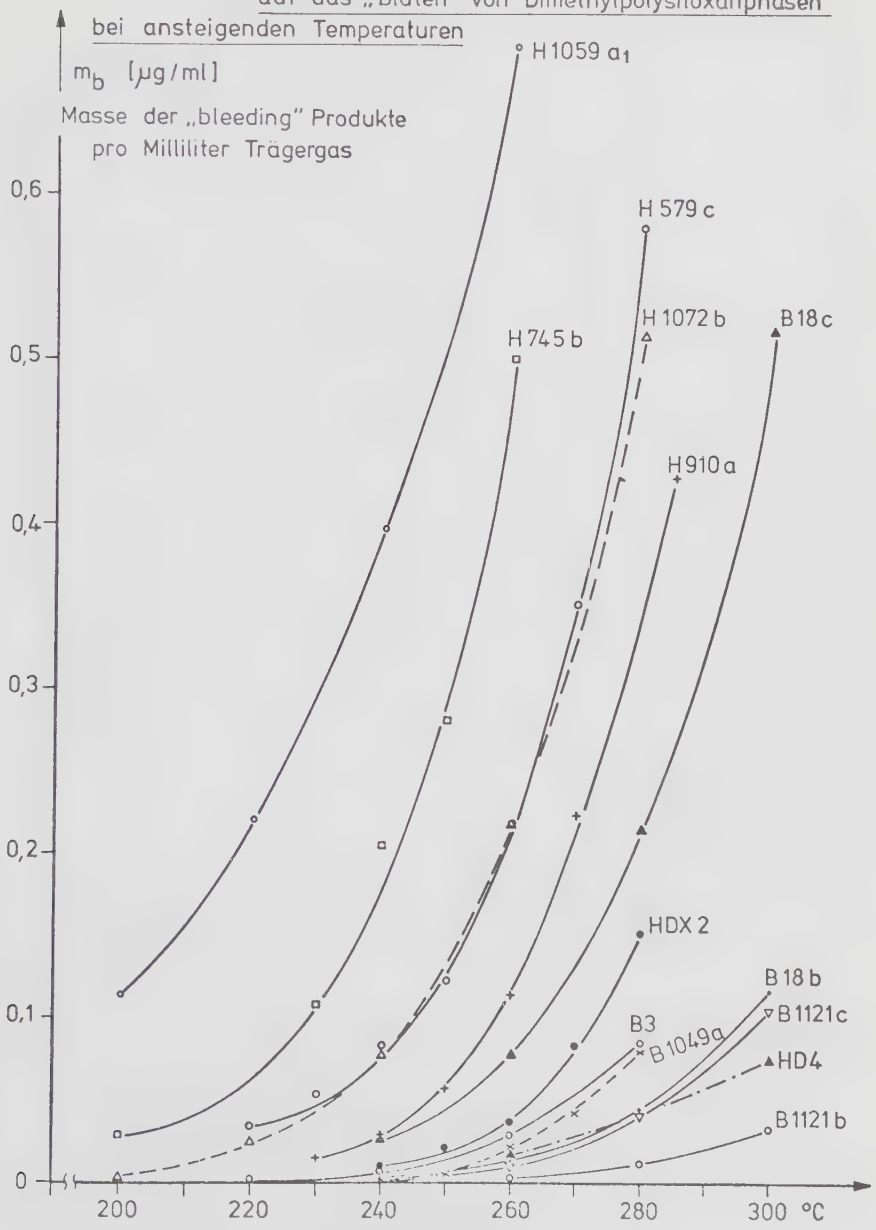


Tabelle 17 a:

Einige Daten der in Abbildung 17 bauf ihr "bleeding"-Verhalten untersuchten Glaskapillarsäulen

Säulen Nr. *	stat. Phase	Glas *	Vorbehandlung	Länge [m]	Filmdicke [nm]
HD 4	OV 101	Duran	keine	25	
HDX 2	OV 101	Duran	keine	50	
B 18 b	OV 101	AR	$HCl/H_2O/HF$	25	140
B 18 c	OV 101	AR	$HCl/H_2O/HF$	15	208
B 1049 a	OV 101	AR	$HCl/H_2O/HF$	49	163
B 3	OV 101	AR	HCl/H_2O	45	79
H 910 a	OV 101	AR	HCl/HF	30	183
H 1072 b	OV 101	AR	keine	25	138
H 745 b	OV 101	AR	CW 20 M **)	30	242
H 579 c	OV 101	AR	HCl/CW 20 M	53	181
H 1059a	OV 101	AR	$BaCO_3$	25	290
B 1121 b	SE 30	AR	$HCl/H_2O/HF$	25	90
B 1121 c	SE 30	AR	$HCl/H_2O/HF$	19	177

* H = Herstellung Husmann
D = Duran (Borsilikatglas)
AR = Alkaliglas
B = Herstellung Borwitzky

** CW 20 M = vorhergehende Desaktivierung mit dem Polyäthylenglykol Carbowax 20 M

Tabelle 17 b: Einfluß verschiedener Glasoberflächen auf das "bleeding" von Dimethylpolysiloxanen bei ansteigenden Temperaturen

Säulen Nr.*	stat. Phase	Glas*	Vorbehandlung	Säulenlänge [m]	Filmdicke [nm]	200 °C	220 °C	230 °C	240 °C	250 °C	260 °C	270 °C	280 °C	300 °
H D4	OV 101	Duran	keine	25							0,018		0,043	0,074
H DX 2	OV 101	Duran	keine	50					0,011	0,022	0,038	0,083	0,152	
B 18 b	OV 101	AR	$HCl/H_2O/HF$	25	140				0,004		0,014		0,44	0,117
B 18 c	OV 101	AR	$HCl/H_2O/HF$	15	208				0,026		0,077		0,214	0,520
B 1049 a	OV 101	AR	$HCl/H_2O/HF$	49	163				0,004	0,005	0,021	0,042	0,079	
B 3	OV 101	AR	HCl/H_2O	45	79		0,002		0,009		0,030		0,085	
H 910 a	OV 101	AR	HCl/HF	30	183			0,015	0,029	0,056	0,113	0,223	0,428	
H 1072 b	OV 101	AR	keine	25	138	0,005	0,026		0,079		0,218		0,515	
H 745 b	OV 101	AR	CW 20 M**	30	242	0,030		0,108	0,205	0,281	0,503	0,828	1,373	
H 579 c	OV 101	AR	HCl/CW 20 M	53	181	0,012	0,033	0,053	0,083	0,122	0,217	0,352	0,582	
H 1059 a	OV 101	AR	$BaCO_3$	25	290	0,114	0,220		0,398		0,693		1,313	
B 1121 b	SE 30	AR	$HCl/H_2O/HF$	25	90						0,002		0,012	0,034
B 1121 c	SE 30	AR	$HCl/H_2O/HF$	19	177				0,002		0,010		0,040	0,104

* H = Herstellung Husmann
D = Duran (Borsilikatglas)
B = Herstellung Borwitzky

** = Desaktivierung mit Carbowax 20 M vor der Belegung

Abbildung 1a a - c

Analyse von Steinkohlenteer auf Glaskapillaren mit verschieden modifizierten Glasoberflächen

Säulen : 45 m, i.D. 0,27 mm
stat. Flüssigkeit: Methyl-, Phenyl-, Vinylpolysiloxan SE 54
Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m / sec bei Endtemperatur

53' 60

a: Alkaliglass, HCl-, HF-geätzt
Filmdicke d_f = 65 nm

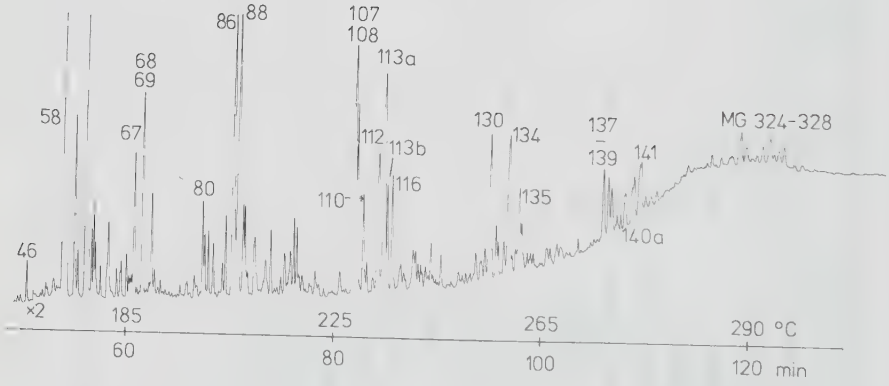
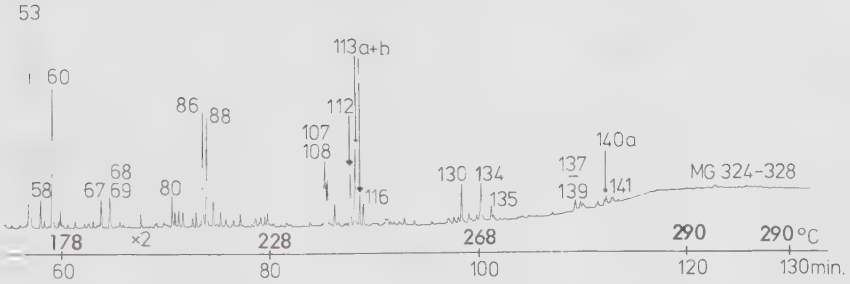


Abbildung 18 a - c:

Analyse von Steinkohlenteer auf Glaskapillarsäulen mit verschieden modifizierten Glasoberflächen

b: Alkaliglas, HCl-geätzt, H_2O-gewaschen
HF-geätzt
Filmdicke d_f = 110 nm



c: Borsilikatglass, unbehandelt
Filmdicke d_f = 69 nm

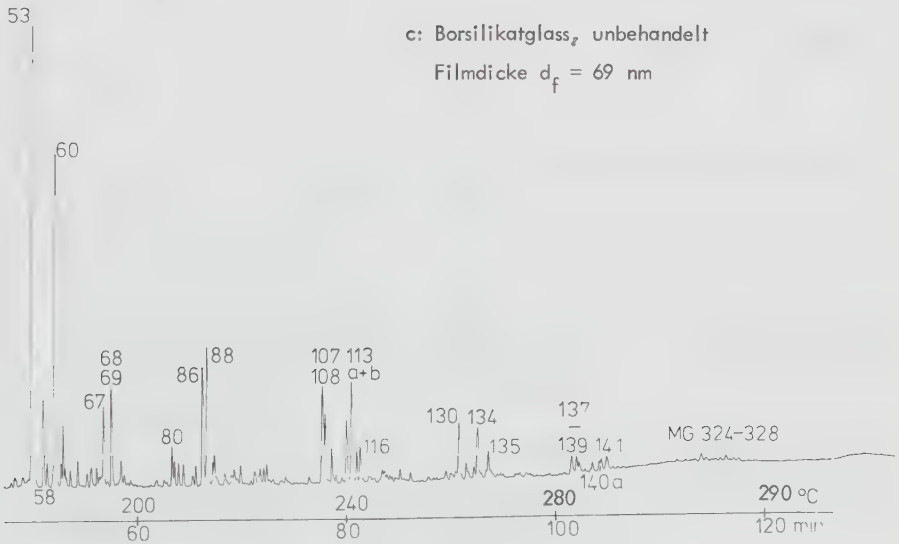


Tabelle 18: Charakteristika der zur Steinkohlenteeranalyse verwendeten Kapillarsäulen

	Kapillare B 1036	Kapillare B 20	Kapillare B 5
Glassorte	Alkaliglas	Alkaliglas	Borsilikatglas
Vorbehandlung	HCl-, HF-Gas bei 350 °C	HCl-Gas bei 450 °C 5x5 ml H_2O HF-Gas bei 450 °C	keine
stat. Phase	SE 54	SE 54	SE 54
Belegung	dynamisch, thermische Behandl.	statisch keine	dynamisch thermische Behandlung
Länge	45 m	45 m	48 m
Filmdicke	65 nm	110 nm	69 nm
n_{theo} / m für	1530	2800	2150
Testverbindung bei	Perylen	Benzo[e]pyren	Benzo[e]pyren
Kapazitätsverhältnis	10,5	16,8	12,0
Temperatur	210 °C	210 °C	210 °C
Trägergas	Wasserstoff	Wasserstoff	Wasserstoff
" geschwindigkeit	0,35 m/sec	0,35 m/sec	0,35 m/sec
bei Endtemperatur im Temperaturprogramm	290 °C	300 °C	300 °C

Zuordnung der Hauptkomponenten

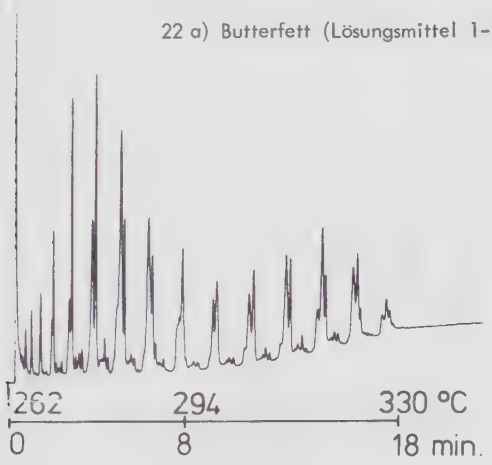
46) 2-Phenylnaphthalin
53) Fluoranthen
58) Acephenanthrylen oder Aceanthrylen
60) Pyren
67) Benzo[a]fluoren
68) Benzo[b]fluoren
69) Benzo[c]fluoren
80) Benzo[c]phenanthren
86) Benzo[a]anthracen
88) Chrysen
107) Benzo[b]fluoranthen
108) Benzo[j]fluoranthen u. Benzo[k]fluoranthen
112) Benzo[e]pyren
113a) Benzo[a]pyren
116) Perylen
130) Indeno[1,2,3-c,d]-pyren
134) Benzo[g,h,i]Perylen
135) Anthanthren
140a) Coronen

Abbildung 22: Analyse von Triglyceriden

Chromatographische Bedingungen

Säule	: HCl-/H_2O-/HF-Behandelt
Stat. Phase	: SE 30 (Dimethylpolysiloxan), Filmdicke 48 nm
Temperatur	: 262 - 330 °C, 4°C/min
Trägergas	: Wasserstoff, 0,35 m/sec bei 330 °C

22 a) Butterfett (Lösungsmittel 1-Methylnaphthalin)



22 b) Vergleichssubstanzen

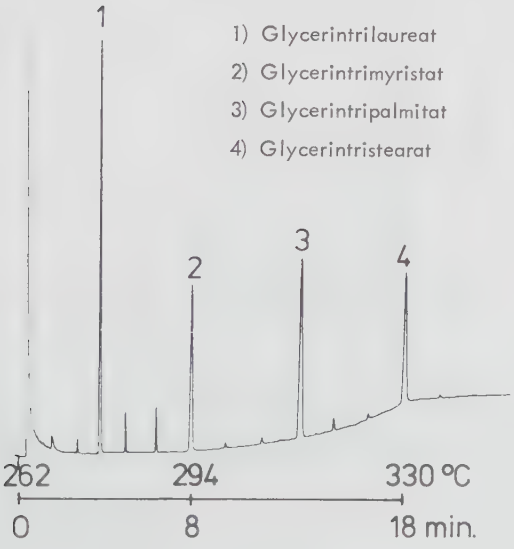


Abb. 23: Trennung von mono-silylierten Diglyceriden auf einer mittelpolaren stationären Flüssigkeit

a: aus einer Hundelunge isolierte Probe b: Vergleichssubstanzen

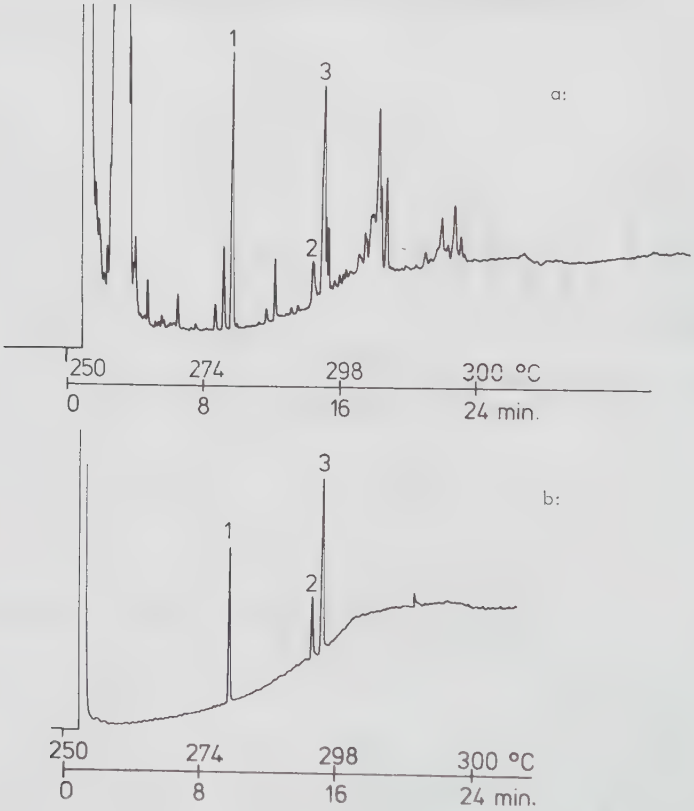
Säule : 20 m, i.D. 0,27 mm

stat. Phase : OV 25 [Phenyl-, Methylpolysiloxan (75:25)]

Filmdicke : 90 nm

Temperaturen : 250 - 300, 3°C / min

Trägergas : Wasserstoff, 0, 34 m/sec bei 250 °C



1) H_2C-OOC-$(CH_2)_{12}$-CH_3
HC-OOC-$(CH_2)_{12}$-CH_3
H_2C-O-$Si(CH_3)_3$

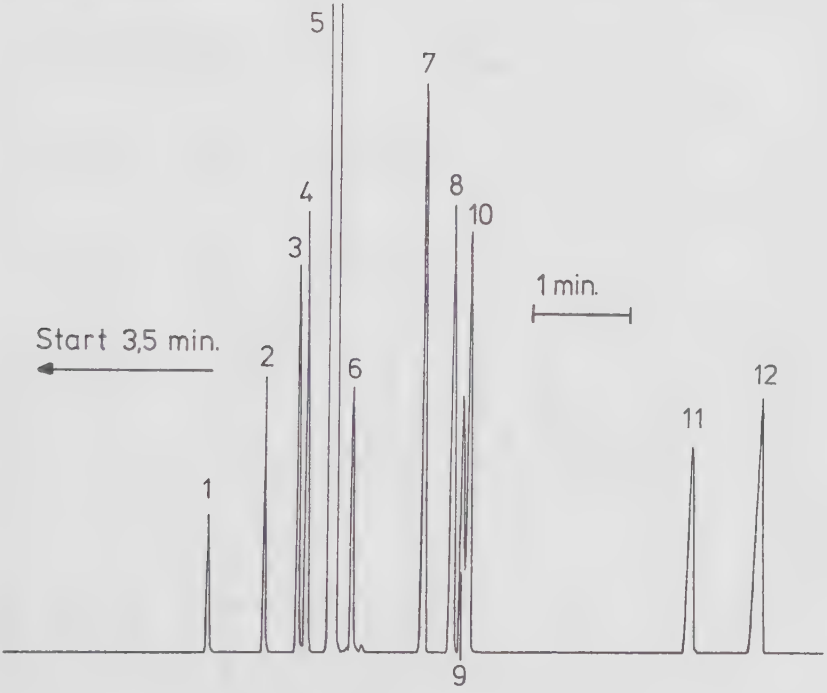
2) H_2C-OOC-$(CH_2)_{14}$-CH_3
HC-O-$Si(CH_3)_3$
H_2C-OOC-$(CH_2)_{14}$-CH_3

3) H_2C-OOC-$(CH_2)_{14}$-CH_3
HC-OOC-$(CH_2)_{14}$-CH_3
H_2C-O-$Si(CH_3)_3$

Abbildung 25:

Elutionsverhalten von Komponenten einer Polaritätsmischung (Schomburg [62]) von einer Glaskapillarsäule ohne organische Desaktivierungsmittel

Substanz	Kovats-Index	Substanz	Kovats-Index
1) Methan	100	7) Toluol	777,2
2) n-Hexan	600	8) Okten-1	794,6
3) Benzol	659,6	9) n-Oktan	800
4) Butanol	671,1	10) Cyclopentanon	803,4
5) n-Heptan	700	11) Dibutyläther	888,7
6) Buttersäuremethylester	721,3	12) n-Nonan	900



Säule : 50 m Alkaliglas, HCl-, H_2O-, HF-behandelt

stat. Phase: Methyl-Phenylpolysiloxan SE 52

Filmdicke : 260 nm

Temperatur : 80 °C

Trägergas : Helium, 0,25 m / sec

Tabelle 20:

Kovats-Retentionsindices von Testverbindungen, die mit Glaskapillarsäulen mit verschieden modifizierten Glasoberflächen erhalten wurden

Stationäre Phase jeweils Superox 4 (Polyäthylenglykol)

	eigene Versuche Säule B 1231 a_1, 25 m, i.D. 0,27 mm HCl-/H_2O-/HF-behandelt, Filmdicke 66 nm				Verzele und Sandra keine Vor-behandlung	Alkaliglas mit NaCl-Dendriten
	Indices bei 80 °C		Indices bei 67 °C		Indices bei 66,5 °C	
Testverbindungen	nach Konditionieren bei 80 °C	bei 250 °C für 12 h	nach Kondit. bei 250 °C für 12 h	nach 5 Tagen Dauerbetrieb zwischen 230 u. 250 °C	nach 2 h Kondit. bei 100 °C	nach 2 h Kondit. bei 240 °C
Octen - 1	842,8	843,6	842,6	843,1		
Benzol	947,8	948,5	943,3	942,6	951	947
Dibutyläther	963,6	963,9	963,2	964,3		
Buttersäuremethylester	979,9	980,5	979,8	980,3		
Toluol	1044,1	1044,7	1038,7	1038,3		
Butanol	1119,0	1120,0	1122,1	1122,4	1184	1132
Cyclopentanon	1175,8	1176,6	1167,8	1167,8		
Pentanon - 2	965,7	968,0	964,7	965,4	978	974
Pyridin	1172,0	1167,7	1158,6	1158,0	1171	1167
Nitropropan	1198,5	1200,2	1196,0	1195,4	1208	1205

Abb. 26: Einfluß der thermischen Behandlung der stationären Phase auf das Elutionsverhalten von polaren "solutes"

a: keine thermische Behandlung

b: thermische Behandlung der stationären Flüssigkeit in der geschlossenen Kapillare für 5 Stunden bei 350 °C

Säule : 50 m Alkaliglas, HCl-, H_2O-, HF-behandelt, i.D. 0,27 mm

stat. Phase: Dexsil 400 (Methylphenylpolycarboransiloxan)

Filmdicke : 86 nm

Temperatur : 80 - 220 °C, 10 °C / min

Trägergas : Stickstoff, 1,0 bar

1) n - Dekan
2) n - Undekan
3) n - Oktanol
4) 2,6 - Dimethylphenol
5) n - Dodekan
6) 2,6 - Dimethylanilin
7) n - Dekansäuremethylester
8) n - Undekansäuremethylester
9) Dicyclohexylamin
10) n - Dodekansäuremethylester

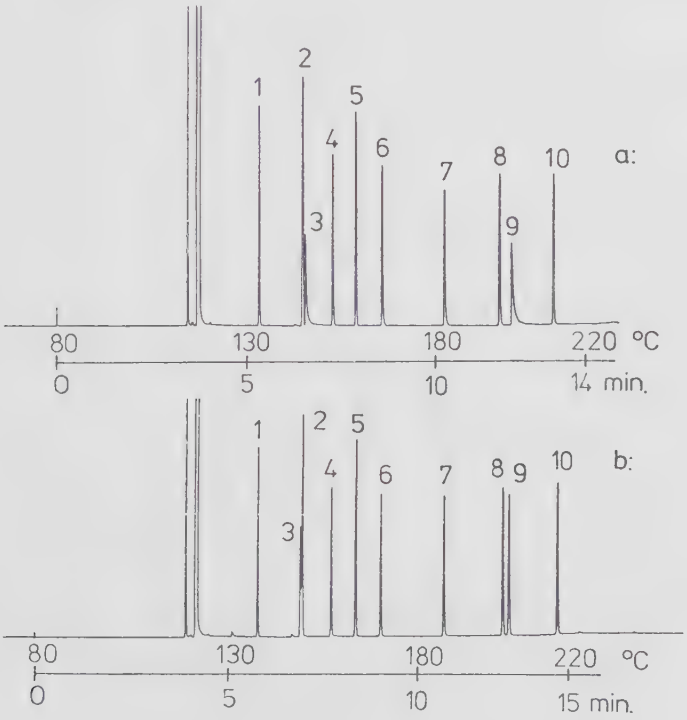


Abb. 28: Gaschromatographie von Monomethyloligoäthylenglykolen auf spezifisch entalkalisierten Alkaliglaskapillaren mit stationären Phasen unterschiedlicher Polarität

a: Säule : 25 m Alkaliglas, HCl-, H_2O-, HF-behandelt, i.D. 0,27 mm
stat. Phase : SE 52 (Methylphenylpolysiloxan)
Filmdicke : 210 nm
Temperaturen : 80 - 300 °C, 5 °C / min.
Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m / sec bei 300 °C

b: Säule : 22 m Alkaliglas, HCl-, H_2O-, HF-behandelt, i.D. 0,27 mm
stat. Phase : Superox - 4 (Polyäthylenglykol mit MG = 4 10^6)
Temperaturen : 168 - 290 °C, 2 °C / min
Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m / sec bei 290 °C

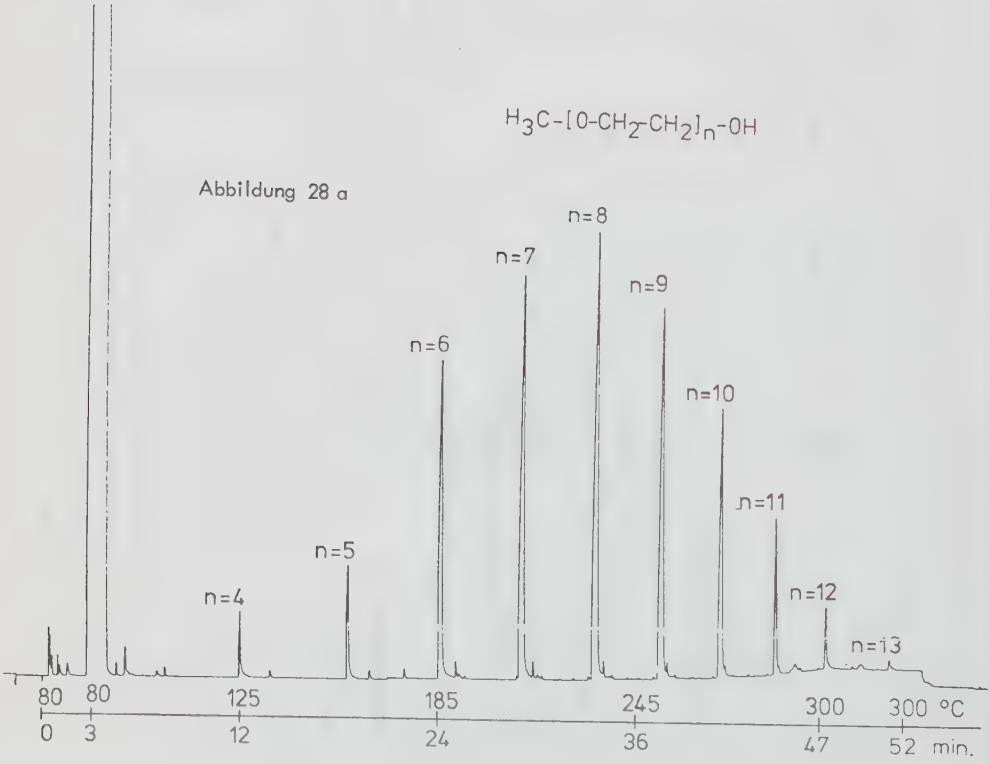


Abbildung 2? b: Gaschromatographie von Monomethyloligoäthylenglykolen auf spezifisch entalkalisierten Alkaliglaskapillaren mit stationären Phasen unterschiedlicher Polarität

Säule : 22 m Alkaliglas, HCl-/H_2O-/HF-behandelt, i.D. 0,27 mm

Stat. Phase : Superox - 4 (Polyäthylenglykol mit einem mittleren MG von $4 \cdot 10^6$)

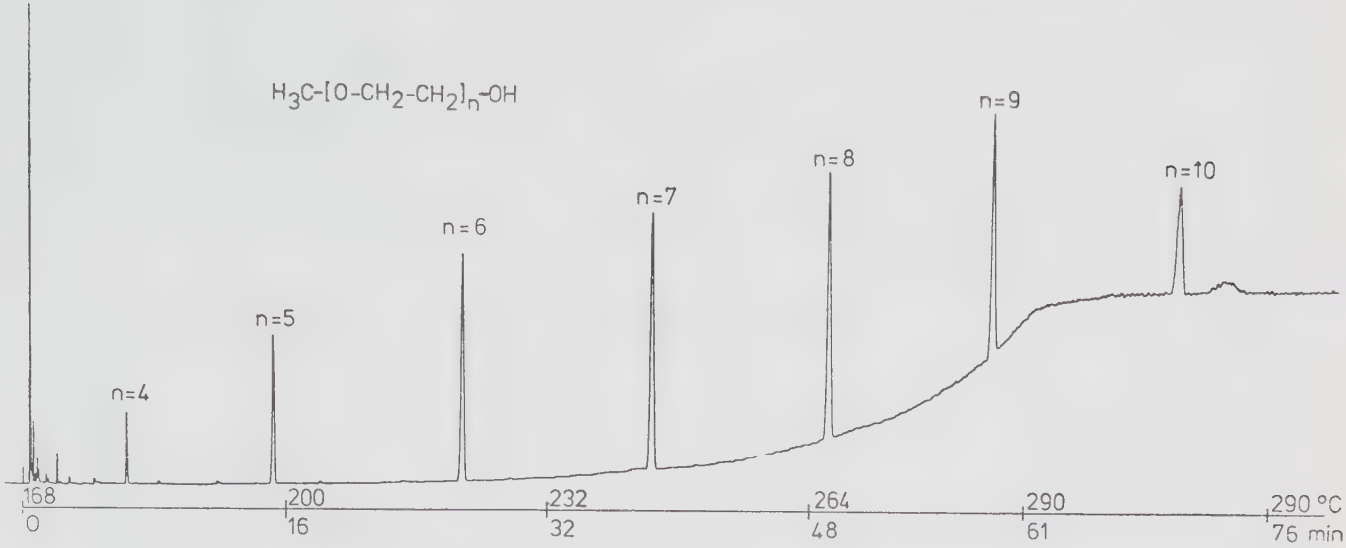
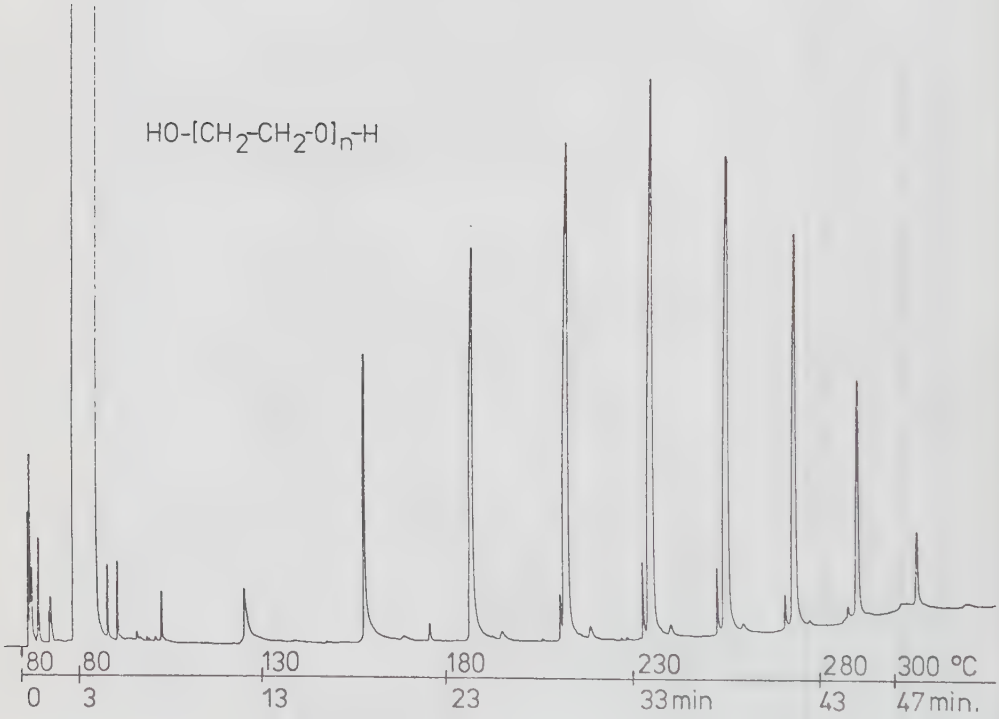


Abb. 29 : Gaschromatographie von Polyäthylenglykol 400 auf spezifisch entalkalisierten Alkaliglaskapillaren

Säule	: 25 m Alkaliglas, HCl-, H_2O-, HF-behandelt, i.D. 0,27 mm
stat. Phase	: SE 52 (Methylphenylpolysiloxan)
Filmdicke	: 210 nm
Temperaturen	: 80 - 300 °C, 5 °C / min
Trägergas	: Wasserstoff, 0,44 m / sec



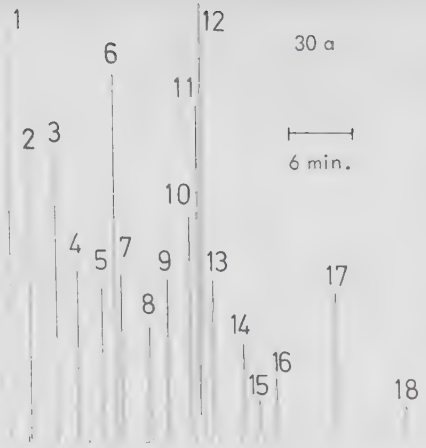


Abbildung 30 a und b:

Polycyclische und heterocyclische aromatische Kohlenwasserstoffe in einer Testmischung (a) und einem großtechnischen Anthracenöl (b)

Säule	: 26 m, i.D. 0,27 mm, Alkaliglas HCl-/H_2O-/HF-behandelt
Stat. Phase	: Dexsil 400 (Methyl-/Phenylpolycarboransiloxan)
Filmdicke	: 160 nm
Temperatur	: 160 °C
Trägergas	: Wasserstoff, 0,35 m/sec
Zuordnung	: Tabelle 21

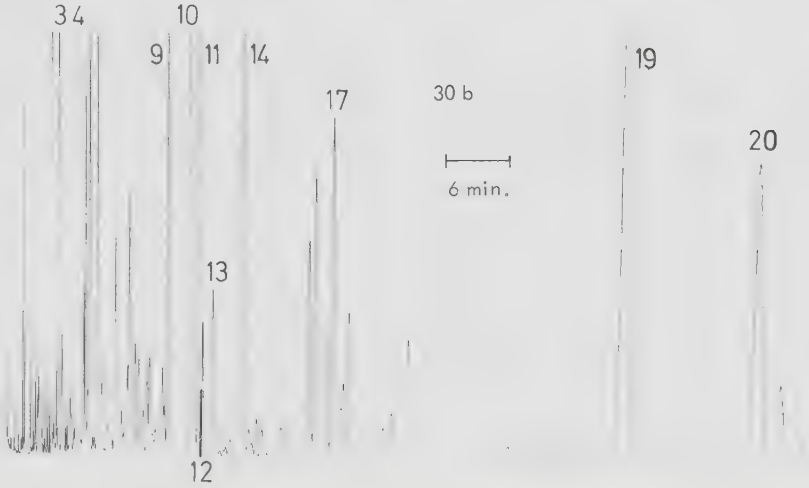


Tabelle 21 : Zuordnung der Peaks zu Abbildungen 30 a und b

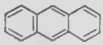
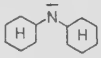
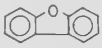
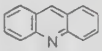
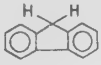
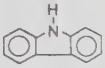
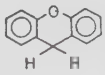
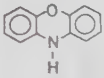
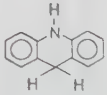
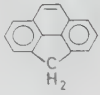
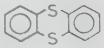
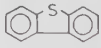
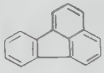
Peak Nr.	Verbindung	Struktur	Peak Nr.	Verbindung	Struktur
1)	2.6-Dimethylanilin		11)	Anthracen	
2)	Dicyclohexylamin		12)	Benzo[h] chinolin	
3)	Dibenzofuran		13)	Acridin	
4)	Fluoren		14)	Carbazol	
5)	Xanthen		15)	Phenoxazin	
6)	9,10-Dihydro-anthracen		16)	9,10-Dihydro-acridin	
7)	9,10-Dihydro-phenanthren		17)	4H Cyclopenta-[d,e,f]phenanthren	
8)	Phenazin		18)	Thianthren	
9)	Dibenzothiophen		19)	Fluoranthen	
10)	Phenanthren		20)	Pyren	

Tabelle 22: Relative Netoretentionszeiten α und Differenzen $\Delta\Delta G$ der Freien Verdampfungsenthalpien ΔG von aufeinanderfolgenden n-Alkanen bei verschiedenen Elutionstemperaturen

Säule : H 778 b, 90 m, i.D. 0,27 mm — Stat. Phase : OV 101 (Dimethylpolysiloxan)

Gerät: Carlo Erba 2150 — Trägergas : Stickstoff, 0,12 m/sec

	Säulentemperatur 80 °C										
	t_m = Methan					t_m = Peterson u. Hirsch mit $C_9/C_{10}/C_{11}$					
n-Alkane	α		$\Delta\Delta G$[J/Mol]			α		$\Delta\Delta G$[J/M]			
	M	S	M	S	P^{*}_{Diff}[%]	M	S	M	S	P^{*}_{Diff}[%]	P_{Diff}[%]**
C_{10}/C_9	2,0601	0,0004	2122,1	0,5	≥ 99,999	2,0430	0,0008	2098	1	0***	99,999
C_{11}/C_{10}	2,0513	0,0006	2109,6	0,8	≥ 99,96	2,0430	0,0008	2098	1	≥ 95	≥ 99,999
C_{12}/C_{11}	2,043	0,004	2098	6	≥ 98,9	2,039	0,004	2092	6	≥ 98,2	≥ 90
C_{13}/C_{12}	2,037	0,002	2090	3	≥ 99,94	2,035	0,002	2087	3	≥ 99,8	≥ 85
C_{14}/C_{13}	2,031	0,003	2080	4		2,030	0,003	2078	4		≥ 48
	Säulentemperatur 90 °C										
C_{10}/C_9	1,9801	0,0007	2063	1	≥ 99,999	1,955	0,002	2024	3	0***	≥ 99,999
C_{11}/C_{10}	1,9674	0,0007	2043	1	≥ 99,999	1,955	0,002	2024	3	93,6	≥ 99,999
C_{12}/C_{11}	1,9627	0,0006	2036	1	≥ 99,97	1,9562	0,0007	2026	1	19	≥ 99,999
C_{13}/C_{12}	1,960	0,001	2031	2	≥ 99,999	1,953	0,001	2026	2	99,999	≥ 99,96
C_{14}/C_{13}	1,9520	0,0008	2019	1	≥ 99,997	1,9502	0,0009	2017	1	99,994	≥ 99,5
C_{15}/C_{14}	1,934	0,003	2001	5		1,939	0,004	1999	6		≥ 28

Tabelle 22, Fortsetzung

Relative Nettoretentionszeiten α und Differenzen $\Delta\Delta G$ der Freien Verdampfungsenthalpien ΔG von n-Alkanen

Säule : H 778 b, Länge 90m, i.D. 0,27 mm — Stat. Phase : OV 101 (Dimethylpolysiloxan)

Gerät : Carlo Erba 2150 — Trägergas : Stickstoff, 0,12 m/sec

n-Alkane	t_m = Methan					t_m = Peterson u. Hirsch mit $C_{11}/C_{12}/C_{13}$					
	α		$\Delta\Delta G$[J/Mol]			α		$\Delta\Delta G$[J/Mol]			
	M	S	M	S	P^*_{Diff}[%]	M	S	M	S	P^*_{Diff}[%]	P_{Diff}[%]**
Säulentemperatur 100 °C											
C_{12}/C_{11}	1,8915	0,0007	1978	1		1,887	0,005	1969	9		≥98
					≥97					0***	
C_{13}/C_{12}	1,889	0,003	1974	4		1,886	0,005	1969	9		≥77
					≥99,9					≥95	
C_{14}/C_{13}	1,883	0,002	1964	3		1,882	0,003	1962	5		≥74
					≥99,9					≥99,5	
C_{15}/C_{14}	1,868	0,004	1939	6		1,868	0,003	1938	6		≥22
Säulentemperatur 110 °C											
C_{12}/C_{11}	1,8267	0,0005	1919	1		1,815	0,001	1899	3		≥99,999
					≥99,999					0***	
C_{13}/C_{12}	1,8215	0,0007	1910	1		1,8151	0,001	1899	3		≥99,999
					≥99,999					≥99,999	
C_{14}/C_{13}	1,816	0,001	1900	2		1,812	0,001	1894	2		≥99,999
					≥99,999					≥99,999	
C_{15}/C_{14}	1,812	0,001	1893	2		1,810	0,001	1889	2		≥99,999

P^*_{Diff} = Wahrscheinlichkeit, mit der sich die α-Werte aufeinanderfolgender n-Alkane unterscheiden

P_{Diff}** = Wahrscheinlichkeit, mit der sich die α-Werte unterscheiden, die einmal aufgrund der Totzeitbestimmung nach Peterson u. Hirsch ^{0} und einmal aufgrund der Totzeitbestimmung mit Methan ermittelt wurden

*** = per Definition Null

Tabelle 23 a: Relative Nettoretentionszeiten α von aufeinanderfolgenden n-Alkanen in Abhängigkeit von der Totzeitbestimmung

Säule : 155 m, i.D. 0,27 mm — Temperatur : 80 °C

Stat. Phase : Dexsil 300 (Dimethylpolycarboransiloxan) — Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

$n_{theoretisch}$: 308 000 bei k'= 21,4 — Trennzahl : 78 für C_{13}/C_{14}

n-Alkane	Totzeit	Totzeitbestimmung nach Peterson und Hirsch mit den aufeinanderfolgenden n-Alkanen					
	CH_4 t_m = 416,6 sec	$C_7/C_8/C_9$ t_m = 416,1 sec	$C_8/C_9/C_{10}$ t_m = 415,4 sec	$C_9/C_{10}/C_{11}$ t_m = 413,1 sec	$C_{10}/C_{11}/C_{12}$ t_m = 412,0 sec	$C_{11}/C_{12}/C_{13}$ t_m = 407,0 sec	$C_{12}/C_{13}/C_{14}$ t_m = 393,8 sec
C_8/C_7	2,13714	2,12468	2,10788	2,05784	2,03408	1,94346	1,76504
C_9/C_8	2,13033	2,12450	2,11654	2,09203	2,07997	2,03127	1,92078
C_{10}/C_9	2,12311	2,12038	2,11663	2,10491	2,09905	2,07465	2,01471
C_{11}/C_{10}	2,11350	2,11223	2,11047	2,10493	2,10214	2,09034	2,06016
C_{12}/C_{11}	2,110753	2,10693	2,10610	2,10348	2,10215	2,09651	2,08178
C_{13}/C_{12}	2,10175	2,10146	2,10107	2,09983	2,09920	2,09652	2,08944
C_{14}/C_{13}	2,09530	2,09516	2,09498	2,09439	2,09409	2,09282	2,08944

Tabelle 23 b: Logarithmen der Nettoretentionszeiten t_s von n-Alkanen in Abhängigkeit von der C-Zahl z $t_m = CH_4$

log t_s	---	2,06967	2,39950	2,72795	3,05492	3,37992	3,70370	4,02628	4,34752
C-Zahl z	1	7	8	9	10	11	12	13	14

$\log t_s = -0,007324\, z^2 + 0,3408\, z - 0,280$ Multipler Korrelationskoeffizient : 1,000 0000

Tabelle 24 a: Natürliche Logarithmen der relativen Nettoretentionszeiten α von aufeinanderfolgenden n-Alkanen in Abhängigkeit von der reziproken, absoluten Temperatur

Gerät: Carlo Erba 2150 Stat. Phase : OV 101 (Dimethylpolysiloxan)

Säule: H 778 b, 90 m, i.D. 0,27 mm Totzeitbestimmung : durch Methan

n-Alkane	T = 80 °C $\frac{1}{T}$ = 2,8317 · 10^{-3} K^{-1}	T = 90 °C $\frac{1}{T}$ = 2,7537 · 10^{-3} K^{-1}	T = 100 °C $\frac{1}{T}$ = 2,6799 · 10^{-3} K^{-1}	T = 110 °C $\frac{1}{T}$ = 2,6099 · 10^{-3} K^{-1}
	ln α	ln α	ln α	ln α
C_{10}/C_9	0,72274 ± 0,00018	0,68313 ± 0,00037		
C_{11}/C_{10}	0,71847 ± 0,00027	0,67673 ± 0,00034		
C_{12}/C_{11}	0,7145 ± 0,0020	0,67432 ± 0,00032	0,63739 ± 0,00036	0,60249 ± 0,00026
C_{13}/C_{12}	0,7117 ± 0,0011	0,67279 ± 0,00071	0,6362 ± 0,0014	0,59964 ± 0,00026
C_{14}/C_{13}	0,7083 ± 0,0013	0,66883 ± 0,00043	0,63308 ± 0,00085	0,59644 ± 0,00053
C_{15}/C_{14}		0,6626 ± 0,0018	0,6250 ± 0,0019	0,59427 ± 0,00055

n - Alkane	Gleichung	Korrel. Koeffizient
C_{12}/C_{11}	$\ln \alpha = 504,64 \cdot \frac{1}{T} - 0,7148$	0,99997
C_{13}/C_{12}	$\ln \alpha = 504,17 \cdot \frac{1}{T} - 0,7156$	0,99993
C_{14}/C_{13}	$\ln \alpha = 502,26 \cdot \frac{1}{T} - 0,7139$	0,99990
C_{15}/C_{14}	$\ln \alpha = 475,5 \cdot \frac{1}{T} - 0,648$	0,9991

Tabelle 24 b:

Chromatographisch ermittelte Differenzen ΔH_v von Verdampfungsenthalpien H_v von aufeinanderfolgenden n-Alkanen.

$$\Delta H_v = H_{v(1)} - H_{v(2)}$$

n-Alkane	J/Mol$_{CH_2}$	cal/Mol$_{CH_2}$
C_{12}/C_{11}	4195,7	1002,4
C_{13}/C_{12}	4191,8	1001,5
C_{14}/C_{13}	4175,9	997,7
C_{15}/C_{14}	3953,4	944,6

Tabelle 24 c:

Chromatographisch ermittelte Differenzen $\Delta\Delta S$ von Entropieänderungen ΔS von aufeinanderfolgenden n-Alkanen.

$$\Delta\Delta S = \Delta S_2 - \Delta S_1$$

n-Alkane	$\frac{J}{K \cdot Mol_{CH_2}}$	$\frac{cal}{K \cdot Mol_{CH_2}}$
C_{12}/C_{11}	- 5,943	- 1,420
C_{13}/C_{12}	- 5,950	- 1,422
C_{14}/C_{13}	- 5,936	- 1,418
C_{15}/C_{14}	- 5,388	- 1,287

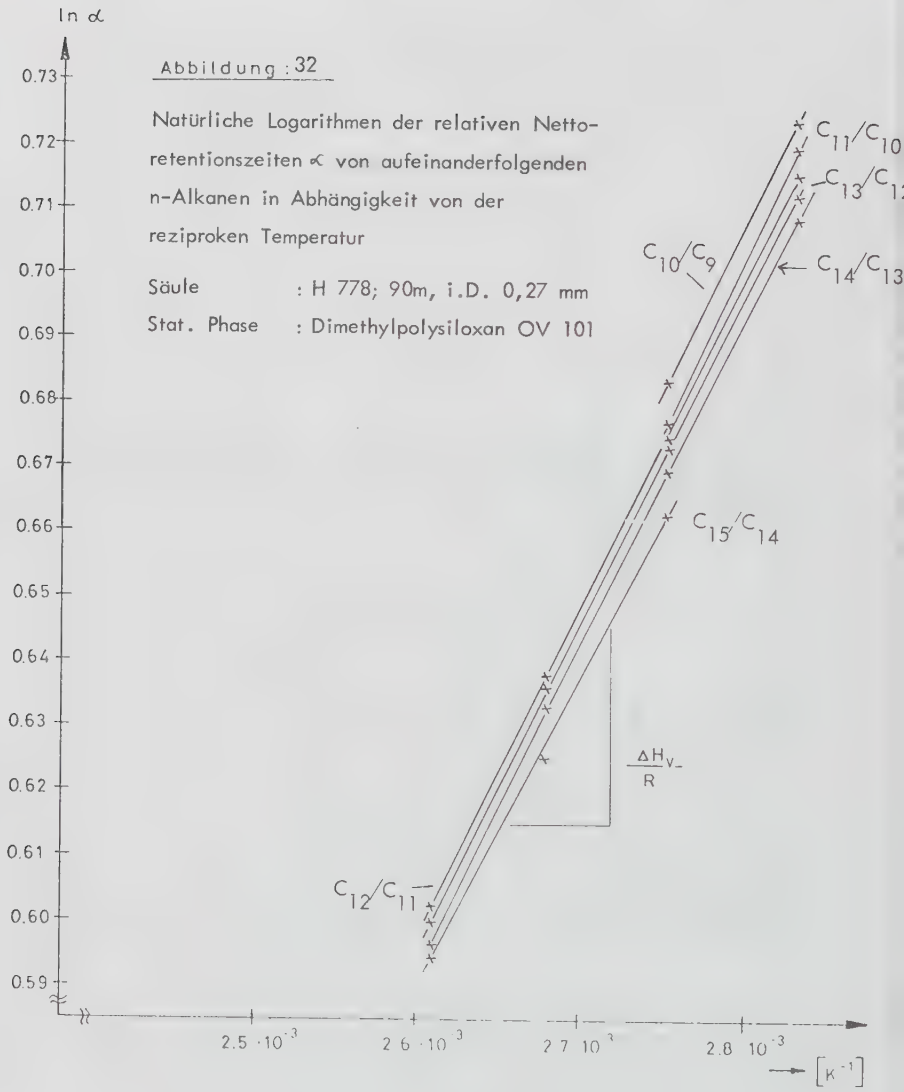


Abbildung : 32

Natürliche Logarithmen der relativen Nettoretentionszeiten α von aufeinanderfolgenden n-Alkanen in Abhängigkeit von der reziproken Temperatur

Säule : H 778; 90m, i.D. 0,27 mm

Stat. Phase : Dimethylpolysiloxan OV 101

Tabelle 25: Relative Nettoretentionszeiten α und Differenzen $\Delta\Delta G$ der Freien Verdampfungsenthalpien ΔG von aufeinanderfolgenden n-Alkanen bei verschiedenen Elutionstemperaturen

Säule : H 695 a, 110m, i.D. 0,27 mm — Stat. Phase : OV 101 (Dimethylpolysiloxan)

Gerät : Varain 2700 — Trägergas : Stickstoff, 0,12 m/sec

n-Alkane	Säulentemperatur 120 °C									
	t_m = Methan					t_m = Peterson u. Hirsch mit $C_{11}/C_{12}/C_{13}$				
	α		$\Delta\Delta G$[J/Mol]			α		$\Delta\Delta G$[J/Mol]		
	M	S	M	S	P^{*}_{Diff}[%]	M	S	M	S	P^{*}_{Diff}[%]	P^{**}_{Diff}[%]
C_{12}/C_{11}	1,7920	0,0007	1907	1	≥ 99,9998	1,762	0,002	1851	4	0***	≥ 96,6
C_{13}/C_{12}	1,779	0,001	1884	2	≥ 99,9998	1,762	0,002	1851	4	≥ 99,96	≥ 99,999
C_{16}/C_{15}	1,755	0,001	1839	3		1,752	0,002	1833	3		≥ 96,9
	Säulentemperatur 130 °C										
C_{12}/C_{11}	1,73	0,01	1835	25	≥ 73	1,709	0,002	1797	4	0***	≥ 99
C_{13}/C_{12}	1,721	0,008	1819	15	≥ 67	1,709	0,002	1797	4	≥ 16	≥ 98,6
C_{14}/C_{13}	1,716	0,005	1811	11	≥ 99,8	1,710	0,002	1797	4	≥ 99,997	≥ 82
C_{15}/C_{14}	1,704	0,002	1787	4	≥ 83	1,7004	0,0007	1779	1	≥ 9	≥ 99,6
C_{16}/C_{15}	1,702	0,002	1783	3	≥ 95	1,7005	0,0007	1780	1	≥ 99,96	≥ 93
C_{17}/C_{16}	1,7050	0,0006	1788	1	≥ 99,999	1,7042	0,0006	1787	1	≥ 99,999	≥ 83
C_{18}/C_{17}	1,6858	0,0009	1753	2		1,6860	0,0002	1752	1		≥ 11

Tabelle 25, Fortsetzung: Relative Nettoretentionszeiten α und Differenzen $\Delta\Delta G$ der Freien Verdampfungsenthalpien ΔG von aufeinanderfolgenden n-Alkanen bei verschiedenen Elutionstemperaturen

Säule : H 695a, 110m, i.D. 0,27 mm — Stat. Phase: OV 101 (Dimethylpolysiloxan)

Gerät : Varain 2700 — Trägergas : Stickstoff, 0,12 m/sec

	α					α					
n-Alkane	M	S	M	S	P^{*}_{Diff}[%]	M	S	M	S	P^{*}_{Diff}[%]	P_{Diff}[%]**
C_{14}/C_{13}	1,668	0,005	1758	11		1,646	0,002	1711	4		≥99,97
					≥ 97					0***	
C_{15}/C_{14}	1,659	0,003	1739	7		1,646	0,002	1711	4		≥99,95
					≥ 78					≥ 80	
C_{16}/C_{15}	1,656	0,003	1733	6		1,648	0,002	1716	4		≥99,7
					≥ 39					≥ 98	
C_{17}/C_{16}	1,657	0,002	1735	5		1,652	0,002	1725	4		≥98
					≥99,998					≥ 99,999	
C_{18}/C_{17}	1,641	0,001	1702	2		1,6383	0,0007	1696	2		≥99,5

P^{*}_{Diff} = Wahrscheinlichkeit mit der sich die α-Werte aufeinanderfolgender n-Alkane unterscheiden

P_{Diff}** = Wahrscheinlichkeit mit der sich die α-Werte unterscheiden, die einmal aufgrund der Totzeitbestimmung nach Peterson u. Hirsch [180] und einmal aufgrund der Totzeitbestimmung mit Methan ermittelt wurden

*** = per Definition Null

Tabelle 26:

Relative Nettoretentionszeiten α und Differenzen $\Delta\Delta G$ der Freien Verdampfungsenthalpien ΔG von aufeinanderfolgenden, hochmeolekularen n-Alkanen bei verschiedenen Elutionstemperaturen

Säule : H 1003b, 48 m, i.D. 0,27 mm Stat. Phase: SE 52 (Methyl-/Phenylpolysiloxan)

Gerät : Carlo Erba 2150 Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

	240 °C			250 °C		
n-ALKANE	α	$\Delta\Delta G$ [J / Mol]	$P_{Diff.}$	α	$\Delta\Delta G$ [J / Mol]	$P_{Diff.}$
C_{24} / C_{22}	1,8242 ± 0,0008	2565 ± 2		1,80 ± 0,02	2557 ± 48	
			≥99,999			≥99,91
C_{26} / C_{24}	1,808 ± 0,002	2527 ± 5		1,77 ± 0,01	2484 ± 25	
						≥99,75
C_{28} / C_{26}			≥99,999	1,751 ± 0,008	2436 ± 20	
C_{29} / C_{27}	1,782 ± 0,002	2465 ± 5				≥99,3
C_{30} / C_{28}				1,739 ± 0,009	2407 ± 23	
						≥99,993
C_{32} / C_{30}				1,720 ± 0,006	2359 ± 15	
C_{34} / C_{32}						

Tabelle 26, Fortsetzung:

Relative Nettoretentionszeiten α und Differenzen $\Delta\Delta G$ der Freien Verdampfungsenthalpien Δ von aufeinanderfolgenden, hochmolekularen n-Alkanen bei verschiedenen Elutionstemperature

Säule : H 1003b, 48 m, i.D. 0,27 mm — Stat. Phase: SE 52 (Methyl-/Phenylpolysiloxan)

Gerät: Carlo Erba 2150 — Trägergas Wasserstoff, 0,35 m/sec

260 °C			270 °C		
α	$\Delta\Delta G$ [J / Mol]	$P_{Diff.}$	α	$\Delta\Delta G$ [J / Mol]	$P_{Diff.}$
			1,717 ± 0,006	2441 ± 16	
					≥99,999
1,717 ± 0,007	2396 ± 18		1,688 ± 0,004	2364 ± 11	
		≥99,999			≥99,999
1,699 ± 0,004	2350 ± 10		1,666 ± 0,002	2305 ± 5	
		≥99,999			≥99,999
1,687 ± 0,003	2318 ± 9		1,653 ± 0,002	2270 ± 5	
		≥99,999			≥99,999
1,672 ± 0,004	2279 ± 11		1,635 ± 0,001	2220 ± 3	
		99,998			≥99,999
1,664 ± 0,004	2257 ± 11		1,630 ± 0,001	2206 ± 3	

Tabelle 27 a: Natürliche Logarithmen der relativen Nettoretentionszeiten α von geradzahligen, hochmolekularen n-Alkanen in Abhängigkeit von der absoluten, reziproken Temperatur

GC-Bedingungen: siehe Tabelle 26				
n-Alkane	T = 240 °C $\frac{1}{T}$ = 0,001949	T = 250 °C $\frac{1}{T}$ = 0,001912	T = 260 °C $\frac{1}{T}$ = 0,001876	T = 270 °C $\frac{1}{T}$ = 0,001841
C_{24}/C_{22}	0,6011 ± 0,0004	0,58 ± 0,01		0,541 ± 0,004
C_{26}/C_{24}	0,592 ± 0,001	0,571 ± 0,006	0,541 ± 0,004	0,524 ± 0,002
C_{28}/C_{26}		0,560 ± 0,005	0,530 ± 0,002	0,510 ± 0,001
C_{30}/C_{28}		0,553 ± 0,005	0,523 ± 0,002	0,503 ± 0,001
C_{32}/C_{30}		0,542 ± 0,004	0,514 ± 0,002	0,4886 ± 0,0006

n-Alkane	Gleichung	Korrelationskoeffizient
C_{24}/C_{22}	$\ln \alpha = 575 \frac{1}{T} - 0,52$	0,991
C_{26}/C_{24}	$\ln \alpha = 657 \frac{1}{T} - 0,69$	0,995
C_{28}/C_{26}	$\ln \alpha = 702 \frac{1}{T} - 0,78$	0,993
C_{30}/C_{28}	$\ln \alpha = 715 \frac{1}{T} - 0,82$	0,995
C_{32}/C_{30}	$\ln \alpha = 757 \frac{1}{T} - 0,91$	0,9997

Tabelle 27 b:

Chromatographisch ermittelte Differenzen ΔH_v von Verdampfungsenthalpien H_v von geradzahligen, hochmolekularen n-Alkanen.

$$\Delta H_v = H_{v(1)} - H_{v(2)}$$

n-Alkane	J/Mol C_2H_4	cal/Mol C_2H_4	J/Mol CH_2	cal/Mol CH_2
C_{24}/C_{22}	4781	1142	2391	571
C_{26}/C_{24}	5462	1305	2731	653
C_{28}/C_{26}	5837	1395	2918	697
C_{30}/C_{28}	5945	1420	2972	710
C_{32}/C_{30}	6294	1504	3174	752

Tabelle 27 c:

Chromatographisch ermittelte Diferenzen $\Delta\Delta S$ von Entropieänderungen ΔS von aufeinanderfolgenden n-Alkanen beim Übergang von der stationären in die mobile Phase.

$$\Delta\Delta S = \Delta S_{(2)} - \Delta S_{(1)}$$

n-Alkane	J/Mol C_2H_4	cal/Mol C_2H_4	J/Mol CH_2	cal/Mol CH_2
C_{24}/C_{22}	- 4,29	- 1,03	- 2,15	- 0,51
C_{26}/C_{24}	- 5,72	- 1,37	- 2,86	- 0,68
C_{28}/C_{26}	- 6,52	- 1,56	- 3,26	- 0,78
C_{30}/C_{28}	- 6,78	- 1,62	- 3,39	- 0,81
C_{32}/C_{30}	- 7,52	- 1,80	- 3,76	- 0,90

Abbildung 33 :

Natürliche Logarithmen der relativen Nettoretentionszeiten von aufeinanderfolgenden geradzahligen n-Alkanen in Abhängigkeit von der reziproken Temperatur

Säule : H 1003 b, 48 m, i.D. 0,27 mm

Stat. Phase : Methyl-/Phenylpolysiloxan SE 52 (95:5)

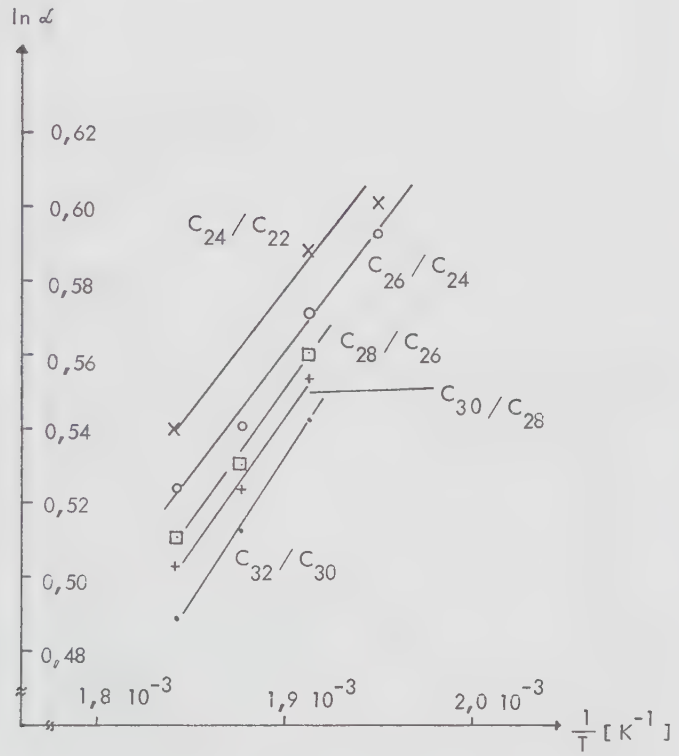


Tabelle 28:

Differenzen von Phasenumwandlungswärmen von aufeinanderfolgenden n-Alkanen in verschiedenen C-Zahl- und Temperaturbereichen, gemessen nach unterschiedlichen Methoden.

Autor:	Kovats [30]	vorliegende Arbeit			Vonach [293]
Stat. Phase	Apiezon	Dimethylpolysiloxan OV 101	Dimethylpolysiloxan OV 101	Methyl-Phenylpolysiloxan SE 52	Oktadecyl RP 18
mobile Phase	nicht angegeben	Stickstoff	Stickstoff	Wasserstoff	Methanol/Wasser (5 : 1)
Temperatur	130 °C	80 - 110 °C	110 - 140 °C	240 - 270 °C	25 °C
n-Alkanbereich	C_4 - C_{12}	C_9 - C_{15}	C_{11} - C_{18}	C_{22} - C_{34}	C_5 - C_{10}
$\Delta\Delta G/Mol_{CH_2}$	495 -520 cal	452 - 507 cal	407 -461 cal	264 - 306 cal	170 cal
$\Delta H/Mol_{CH_2}$	1176 -1189 cal (25 °C)	945 - 1002 cal	819 - 943 cal	571 - 752 cal	985 cal
$\Delta\Delta S$		$\left\|1{,}3\text{-}1{,}4\right\| \frac{cal}{K \cdot Mol_{CH_2}}$	$\left\|0{,}93\text{-}1{,}25\right\| \frac{cal}{K\ Mol_{CH_2}}$	$\left\|0{,}51\text{-}0{,}90\right\| \frac{cal}{K\ Mol_{CH_2}}$	$\left\|11{,}3\right\| \frac{cal}{K \cdot Mol_{CH_2}}$

Tabelle 29: Relative Nettoretentionszeiten α und Differenzen $\Delta\Delta G$ der Freien Verdampfungsenthalpien ΔG von n-Alkanen aus stationären Flüssigkeiten unterschiedlicher Polarität

ansteigende Polarität →

n-Alkane	$C_{87}H_{176}$				Polyphenyläther PPE 20				Polyäthylenglykol 20 M			
	M	S	$\Delta\Delta G$ [J/Mol]	$P^*_{Diff.}$ [%]	M	S	$\Delta\Delta G$ [J/Mol]	$P^*_{Diff.}$ [%]	M	S	$\Delta\Delta G$ [J/Mol]	$P^*_{Diff.}$ [%]
C_{26}/C_{24}	1,916	0,002	2828 ± 5		1,731	0,002	2386 ± 5					
				99,999				62,3				
C_{28}/C_{26}	1,9063	0,0005	2806 ± 1		1,729	0,006	2382 ± 15		1,71	0,04	2300 ± 100	
				99,999				95,9				98,8
C_{30}/C_{28}	1,901	0,002	2794 ± 5		1,724	0,003	2369 ± 8		1,68	0,02	2257 ± 52	
								97,3				96,8
C_{32}/C_{30}					1,721	0,002	2361 ± 5		1,66	0,01	2205 ± 26	
								99,993				99,999
C_{34}/C_{32}					1,716	0,002	2349 ± 5		1,639	0,008	2149 ± 21	
								99,93				23
C_{36}/C_{34}					1,711	0,003	2336 ± 7		1,639	0,007	2149 ± 19	
								98,5				99,999
C_{38}/C_{36}					1,714	0,002	2344 ± 5		1,614	0,005	2082 ± 13	
								99,999				
C_{40}/C_{38}					1,705	0,003	2321 ± 8					

P^*_{Diff} = Wahrscheinlichkeit mit der sich die α-Werte aufeinanderfolgender n-Alkane unterscheiden

Abbildung 34 : Übersichtschromatogramm von Braunkohlenteer

Säule : 25 m, i.D. 0,27 mm, HCl-, H_2O-/HF-behandelt

Stat. Phase : SE 30 (Dimethylpolysiloxan)

Temperaturen : 60 - 300 °C ; 4° C / min.

Trägergas : Helium, 0,25 m/sec bei 300 °C

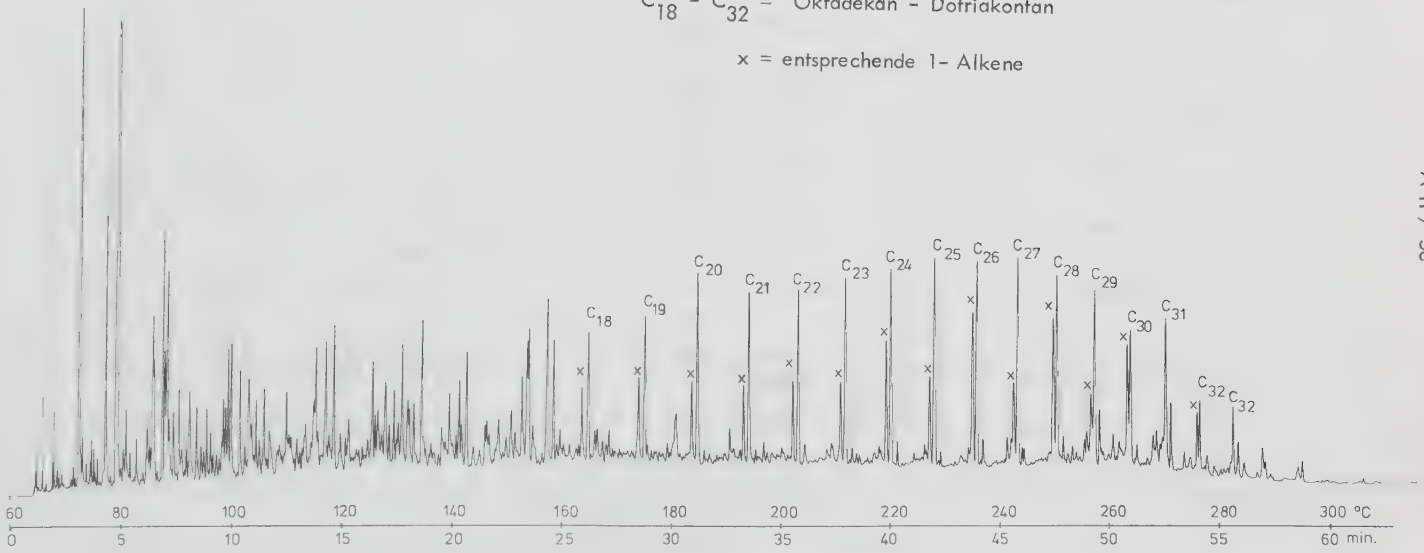


Abbildung 35: Analyse von stereoisomeren Kohlenwasserstoffen

a) Übersichtschromatogramm eines paraffinbasischen Erdöldestillats (Siedebereich 250 - 330 °C, 760 Torr)

Säule : 140 m, i.D. 0,27 mm

Stationäre Phase: $C_{87}H_{176}$

Temperatur : 100 - 230 °C, 0,8 °C/min

Trägergas : Wasserstoff, 0,40 m/sec bei 230 °C

1) 2,6,10 Trimethylpentadekan

2) Pristan (2,6,10, Tetramethylpentadekan)

3) Phytan (2,6,10,14 Tetramethylhexadekan

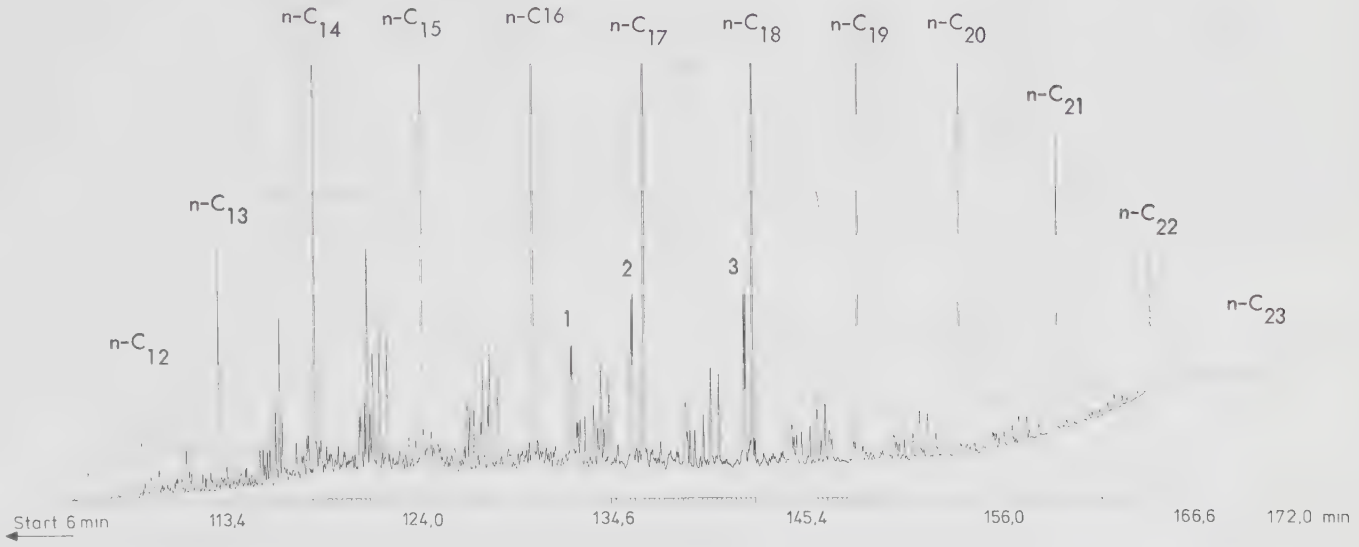


Abbildung 35 : Analyse von stereoisomeren Kohlenwasserstoffen

b) Ausschnitt eines Übersichtschromatogramms von einem paraffinischen Erdöldestillat (Siedebereich 250 - 330 °C, 760 Torr)

Bedingungen : siehe Abbildung 38 a

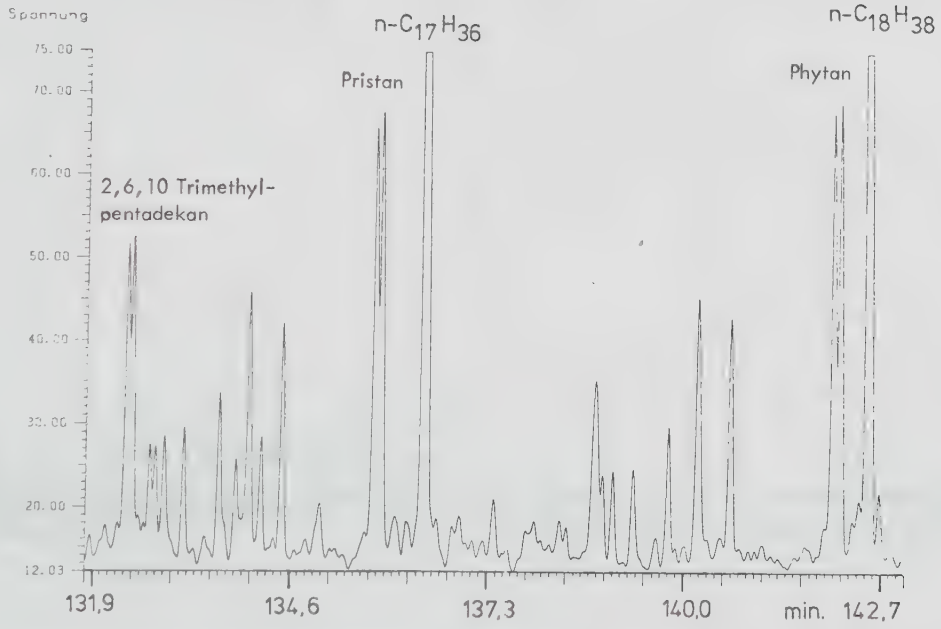


Tabelle 30 : **Trennung von diastereomeren Kohlenwasserstoffen**

a: Stationäre Flüssigkeit : Dimethylpolysiloxan OV 101

Säule : 100 m, i.D. 0,27 mm

Trenneffiziens : n_{theo} = 217 000 bei k' = 17,4

	Diastereomere des Pristans			Diastereomere des Phytans		
Säulentemperatur T	120 °C	130 °C	150 °C	120 °C	130 °C	150 °C
$1/T$ [K^{-1}]	0,0025436	0,0024805	0,0023632	0,0025436	0,0024805	0,0023632
α	1,00947	1,00808	1,00549	1,01118	1,00976	1,00696
$\ln \alpha$	0,009429	0,008044	0,005474	0,01112	0,009709	0,006937
$\ln \alpha = 21,92 \frac{1}{T} - 0.046$	Korrelationskoeffizient : 0,99 999			$\ln \alpha = 23,63 \frac{1}{T} - 0,049$	Korrel. Koeff.: 0,999 999	
$\Delta\Delta G$ [J/Mol]	30,82	26,96	19,26	36,35	32,54	24,41
ΔH_v [J/Mol]	182,2 im untersuchten Temperatur - Bereich			193,2 im untersuchten Temperatur - Bereich		
$\Delta\Delta S$ [J/Mol K]	- 0,38 im			- 0,40 im		
Kovats-Indices [IE]	1707,7	1708,4	--	1809,5	1810,6	--
" [IE]	1709,4	1710,0	--	1811,6	1812,4	--
ΔI [IE]	1,7	1,6	--	2,1	1,8	--
Auflösung A	1,177	0,872	--	1,253	1,025	--

Tabelle 30 : Trennung von diastereomeren Kohlenwasserstoffen

b : Stationäre Flüssigkeit : $C_{87}H_{176}$
Säule : 140 m, i.D. 0,27 mm
Trenneffiziens : n_{theo} = 295 000 bei k' = 20,42

	Diastereomere des Pristans			Diastereomere des Phytans		
Säulentemperatur T	130 °C	150 °C	180 °C	130 °C	150 °C	180 °C
1 / T [K^{-1}]	0,0024805	0,0023632	0,0022068	0,0024805	0,0023632	0,0022068
α	1,0085	1,0074	1,0045	1,0116	1,0092	1,0063
ln α	0,008489	0,007373	0,004490	0,011570	0,009158	0,006280
ln $\alpha = 14,82 \frac{1}{T} - 0,028$ Korrel. Koeff.: 0,986				ln $\alpha = 19,28 \frac{1}{T} - 0,036$ Korrel. Koeff.: 0,9995		
$\Delta\Delta G$ [J/Mol]	28,45	25,94	16,92	38,78	32,22	23,66
ΔH_v [J/Mol]	123,2 im untersuchten Temperatur - Bereich			160,3 im untersuchten Temperatur - Bereich		
$\Delta\Delta S$ [J/Mol K]	- 0,23 im			- 0,30 im		
Kovats-Indices [IE]		1688,8	1689,2		1791,7	1792,6
" [IE]	--	1690,2	1690,2	--	1793,3	1793,9
I [IE]	--	1,4	1,0	--	1,6	1,3
Auflösung A	1,051	--	--	1,301	1,225	--

Tabelle 30 : Trennung von diastereomeren Kohlenwasserstoffen

c : Stationäre Flüssigkeit : Polyäthylenglykol Carbowax 20 M

Säule : 85 m, i.D. 0,27 mm

Trenneffiziens : n_{theo} = 131 000 bei k' = 38,39

	Diastereomere des Pristans			Diastereomere des Phytans		
Säulentemperatur T	90 °C	100 °C	120 °C	90 °C	100 °C	120 °C
$1/T\ [K^{-1}]$	0,0027536	0,0026798	0,0025436	0,0027536	0,0026798	0,0025436
α	1,0106	1,0095	--	1,0135	1,0115	1,0095
$\ln \alpha$	0,0105	0,009503	--	0,013406	0,011440	0,009440
				$\ln \alpha = 18,36 \frac{1}{T} - 0,037$ Korrel. Koeff. = 0,986		
G [J/Mol]	31,71	29,48	--	40,48	35,49	30,86
H_v [J/Mol]	--	--	--	152,7 im untersuchten Temperatur - Bereich		
S [J/Mol K]	--	--	--	- 0,31 im		
Auflösung A	0,84	0,75	--	1,161	1,072	0,79

Abbildung 35: Analyse von stereoisomeren Kohlenwasserstoffen

c) Abhängigkeit der natürlichen Logarithmen der relativen Nettoretentionszeiten α der Pristan- und Phytan-Diastereomeren von der Elutionstemperatur und der stationären Flüssigkeit

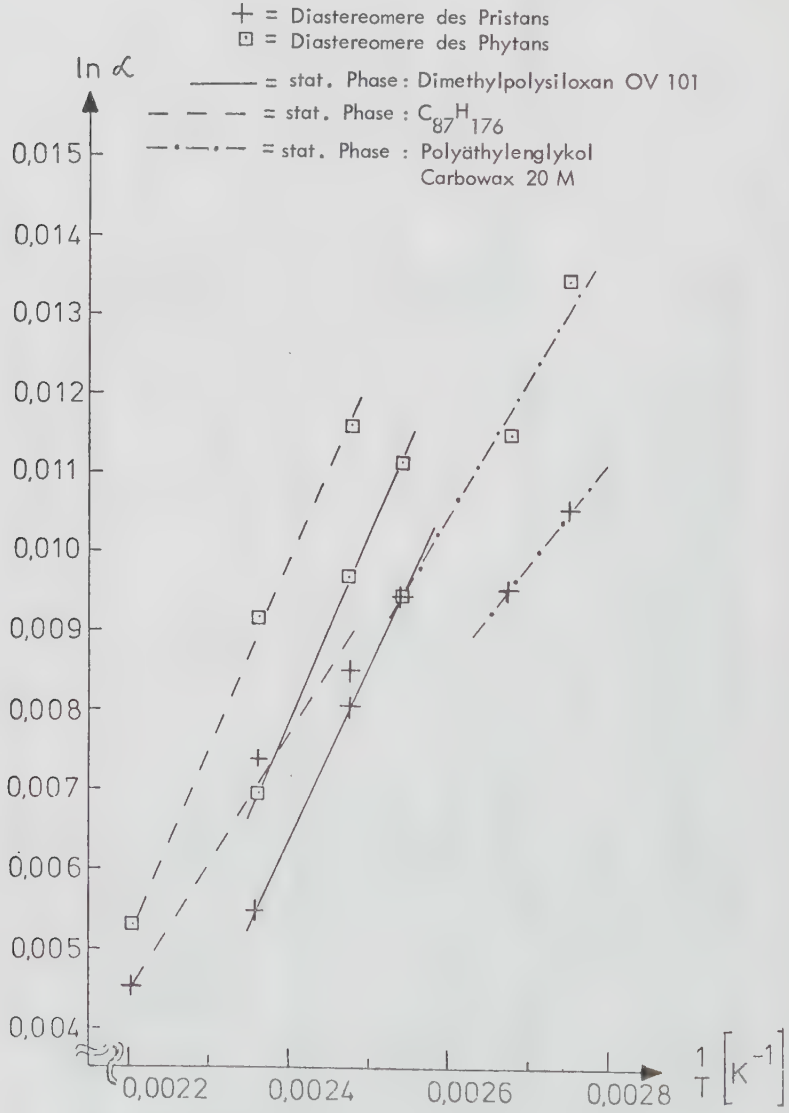


Abbildung 35 : Analyse von stereoisomeren Kohlenwasserstoffen

d) Abhängigkeit der gaschromatographischen Auflösung von der Elutionstemperatur

Säule	: 85 m, i.D. 0,27 mm
Stationäre Phase	: Carbowax 20 M (Polyäthylenglykol)
Temperatur	: 120 °C
Trägergas	: Wasserstoff, 0,35 m/sec

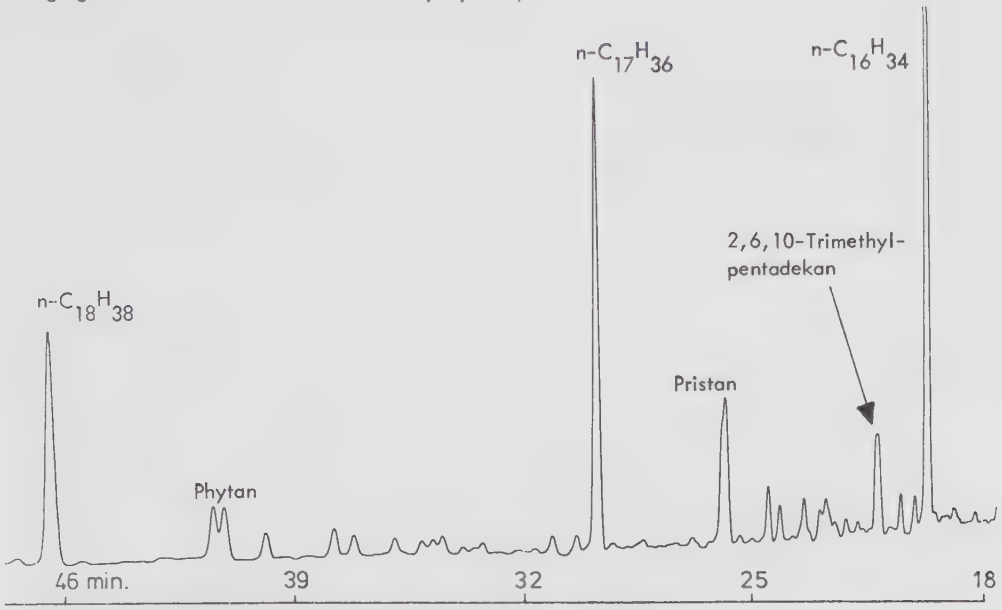


Abbildung 35: Analyse von stereoisomeren Kohlenwasserstoffen

e) Abhängigkeit der gaschromatographischen Auflösung von der Temperatur

Säule	: 85 m, i.D. 0,27 mm
Stationäre Phase	: Carbowax 20 M (Polyäthylenglykol)
Temperatur	: 90 °C
Trägergas	: Wasserstoff, 0,35 m/sec

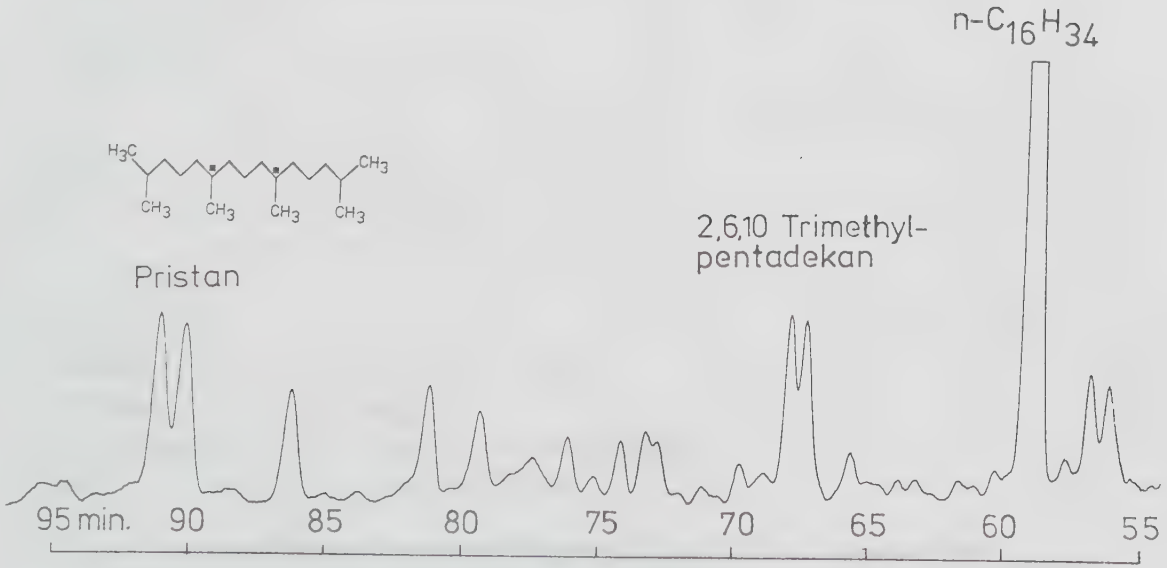


Abbildung 35: Analyse von stereoisomeren Kohlenwasserstoffen

f) Abhängigkeit der gaschromatographischen Auflösung von der Temperatur

Säule	: 85 m, i.D. 0,27 mm
Stationäre Phase	: Carbowax 20 M (Polyäthylenglykol)
Temperatur	: 90 °C
Trägergas	: Wasserstoff, 0,35 m/sec

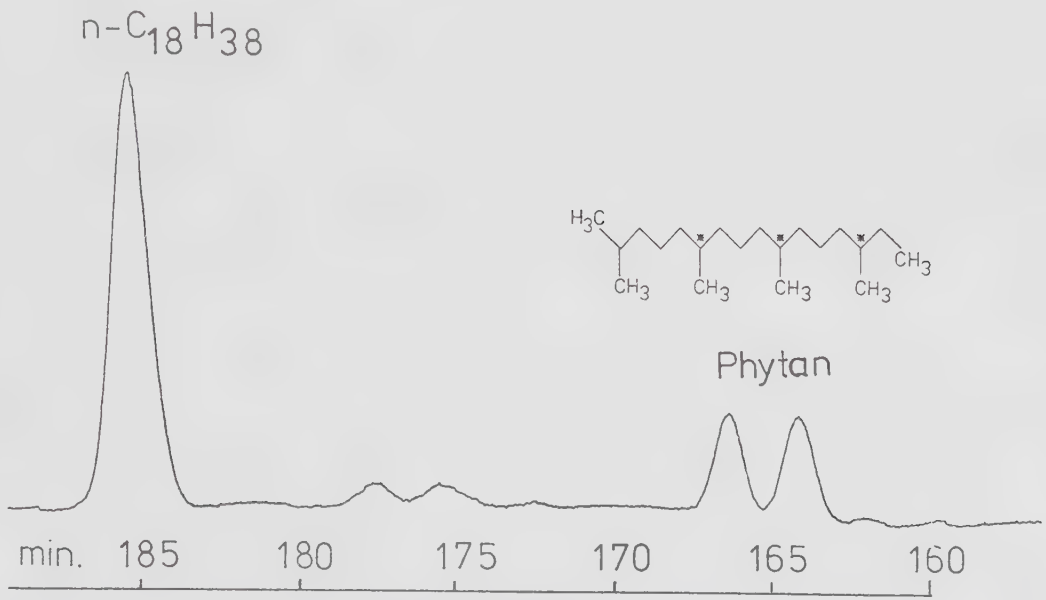


Abbildung 35: Analyse von stereoisomeren Kohlenwasserstoffen

g) Verbesserung der gaschromatographischen Auflösung mit Glaskapillarsäulen von hoher Trenneffizienz und sorgfältiger Optimierung

Säule : 140 m, i.D. 0,27 mm

Stat. Phase : $C_{87}H_{176}$

Temperatur : 130 °C

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m / sec

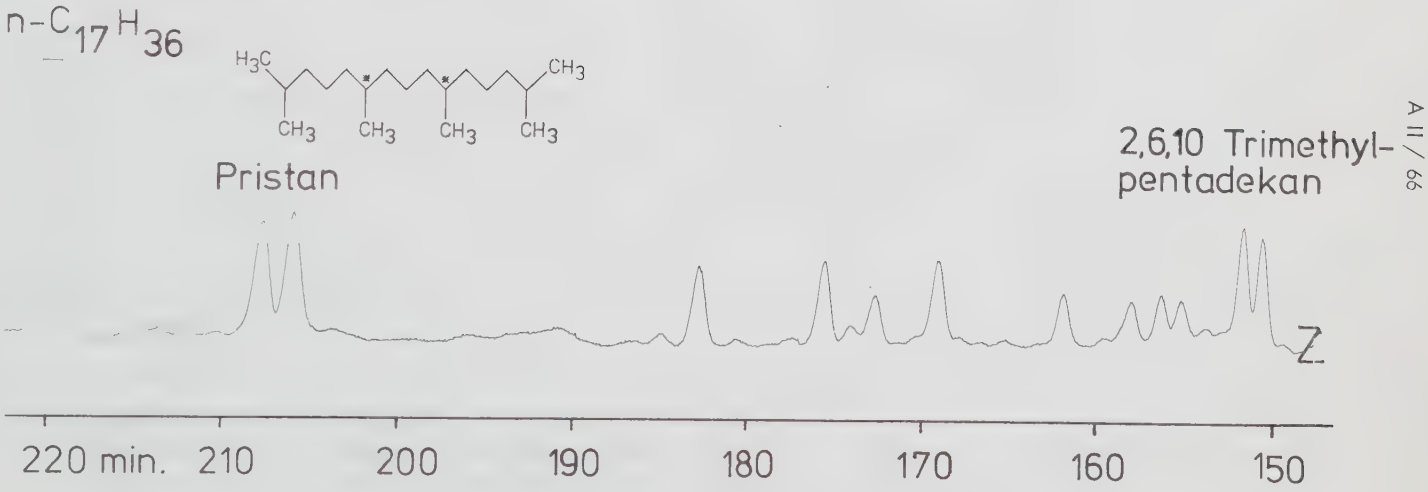


Abbildung 36

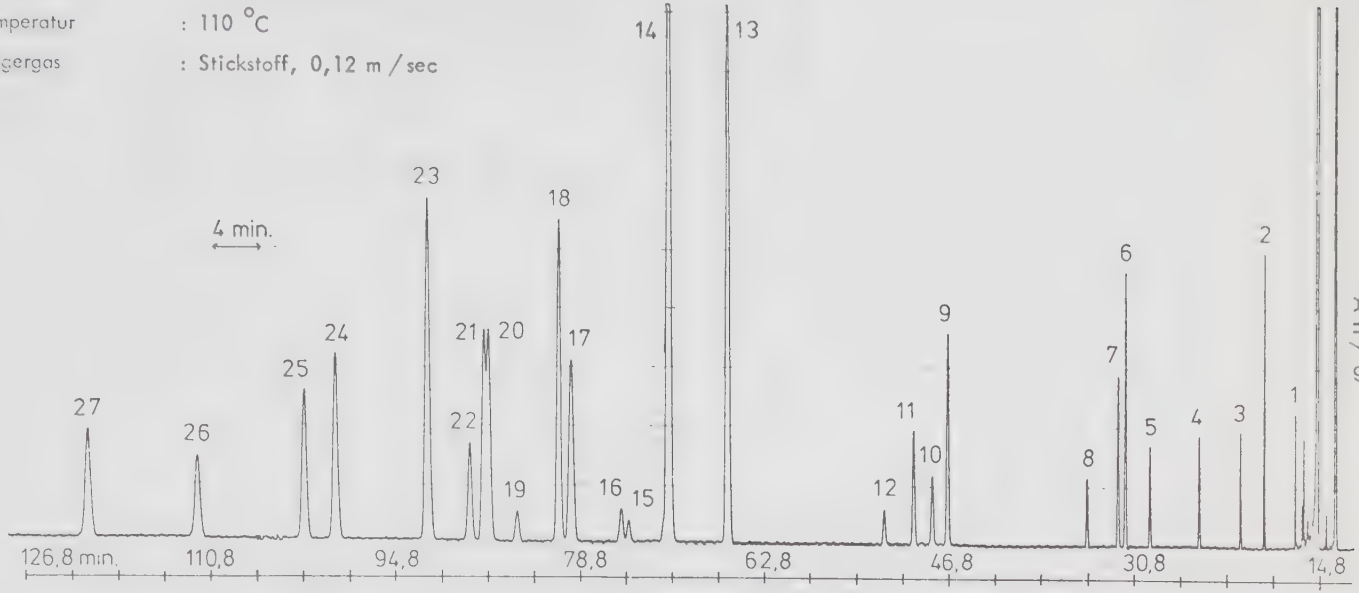
Trennung von zwei- und dreiringigen polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (Zuordnung Tabelle 31)

Säule : 90 m, i.D. 0,27 mm

Stat. Phase : Dimethylpolysiloxan OV 101

Temperatur : 110 °C

Trägergas : Stickstoff, 0,12 m / sec



A II / 67

Tabelle 31:

Trennung von zwei- und dreiringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen.

Säule	: 90 m, i.D. 0.27 mm
Stat. Phase	: OV 101 (Dimethylpolysiloxan)
Temperatur	: 110 °C
Trägergas	: Stickstoff, 0.12 m/sec.

Peak Nr.	Komponente
1.	n-Nonan
2.	Benzo[b]furan
3.	Inden
4.	n-Undekan
5.	1,2,3,4-Tetrahydronaphthalin
6.	Naphthalin
7.	Benzo[b]thiophen
8.	n-Dodekan
9.	2-Methylnaphthalin
10.	Azulen
11.	1-Methylnaphthalin
12.	n-Tridekan
13.	Biphenyl
14.	2-Äthylnaphthalin
15.	2,6-Dimethylnaphthalin
16.	2,7-Dimethylnaphthalin
17.	1,3-Dimethylnaphthalin
18.	1,7-Dimethylnaphthalin
19.	n-Tetradekan
20.	2,3-Dimethylnaphthalin
21.	1,5-Dimethylnaphthalin
22.	Acenaphthylen
23.	1,2-Dimethylnaphthalin
24.	1,8-Dimethylnaphthalin
25.	Acenaphthen
26.	4-Methylbiphenyl
27.	Dibenzofuran

Abbildung 35: Analyse von stereoisomeren Kohlenwasserstoffen

h) Verbesserung der gaschromatographischen Auflösung durch Anwendung von Glaskapillaren von hoher Trenneffiziens und sorgfältiger Optimierung

Säule	: 140 m, i.D. 0,27 mm
Stationäre Phase	: $C_{87}H_{176}$
Temperatur	: 130 °C
Trägergas	: Wasserstoff, 0,35 m/sec

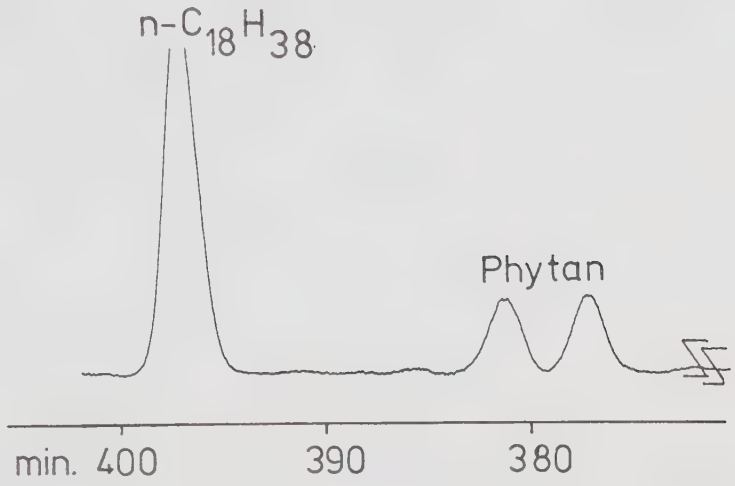


Abbildung 39 :

Trennung von zwei- und dreiringigen polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (Zuordnung Tabelle 35)

Säule : 90 m, i.D. 0,27 mm

Stat. Phase : Dimethylpolysiloxan OV 101

Temperatur : 110 °C

Trägergas : Stickstoff, 0,12 m / sec

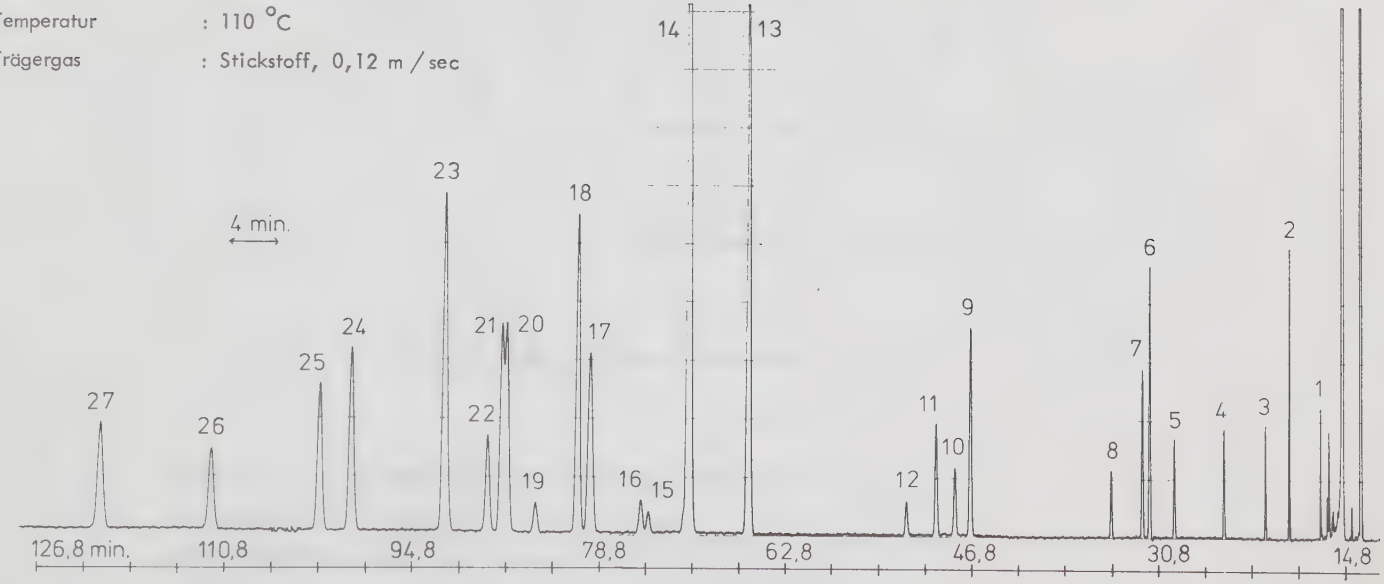


Tabelle 32: Relative Nettoretentionszeiten α und Differenzen $\Delta\Delta G$ der Freien Verdampfungsenthalpien von einigen Naphthalinderivaten

Gerät: Carlo Erba 2150 Säule: H 778b, 90 m OV 101 (Dimethylpolysiloxan) Trägergas: Stickstoff, 0,12 m/sec

Verbindungen	t_m = Methan				t_m = Peterson u. Hirsch mit $C_9/C_{10}/C_{11}$				
	α		$\Delta\Delta G$[J/Mol]				$\Delta\Delta G$[J/Mol]		
	M	S	M	S	M	S	M	S	P_{Diff} **
Säulentemperatur 80 °C									
Benzo[b]thiophen/ Naphthalin	1,0442	0,0007	127	2	1,0441	0,0007	127	2	≥ 26
Azulen/Naphthalin	2,113	0,004	2196	6	2,107	0,004	2188	6	≥ 94,9
1-Me-Naphthalin/ 2-Me-Naphthalin	1,098	0,002	275	5	1,098	0,002	275	5	≥ 7
Acenaphthen/ Acenaphthylen	1,2256	0,0007	597	2	1,2255	0,0007	597	2	≥ 25
Säulentemperatur 90 °C									
Benzo[b]thiophen/ Naphthalin	1,0412	0,0007	125	2	1,0412	0,0005	122	2	≥ 2
Azulen/Naphthalin	2,044	0,001	2158	2	2,040	0,002	2152	3	≥ 99,97
1-Me-Naphthalin/ 2-Me-Naphthalin	1,0922	0,0003	266,4	0,7	1,0921	0,0002	265,9	0,6	≥ 83
Acenaphthen/ Acenaphthylen	1,2139	0,0004	585	2	1,2138	0,0005	585	1	≥ 18

Tabelle 32, Fortsetzung: Relative Nettoretentionszeiten α und Differenzen $\Delta\Delta G$ der Freien Verdampfungsenthalpien von einigen Naphthalinderivaten

Gerät: Carlo Erba 2150 Säule: H 778b, 90 m OV 101 (Dimethylpolysiloxan) Trägergas: Stickstoff, 0,12 m/sec

	Säulentemperatur 100 °C								
	t_m = Methan				t_m = Peterson u. Hirsch mit $C_{11}/C_{12}/C_{13}$				
	α		$\Delta\Delta G$[J/Mol]				G[J/Mol]		
Verbindungen	M	S	M	S	M	S	M	S	P_{Diff}**
Benzo[b]thiopher / Naphthalin	1,0376	0,0001	114,5	0,3	1,0375	0,0002	114,3	0,5	≥ 44
Azulen/Naphthalin	1,9785	0,0007	2117	1	1,975	0,004	2111	6	≥ 96
1-Me-Naphthalin / 2-Me-Naphthalin	1,0897	0,0003	266,6	0,8	1,0896	0,0001	266,1	0,4	≥ 84
	Säulentemperatur 110 °C								
Benzo[b]thiophen/ Naphthalin	1,0355	0,0002	111,2	0,5	1,0352	0,0001	110,1	0,4	≥ 99,999
Azulen/Naphthalin	1,9211	0,0006	2080	1	1,913	0,001	2067	2	≥ 66
1-Me-Naphthalin/ 2-Me-Naphthalin	1,0877	0,0007	268	2	1,0873	0,0007	267	2	≥ 96
Acenaphthen/ Acenaphthylen	1,917	0,0005	359	1	1,912	0,0005	577	1	≥ 95

** Wahrscheinlichkeit mit der sich die α -Werte unterscheiden, die nach den zwei verschiedenen Totzeitbestimmungen erhalten wurden

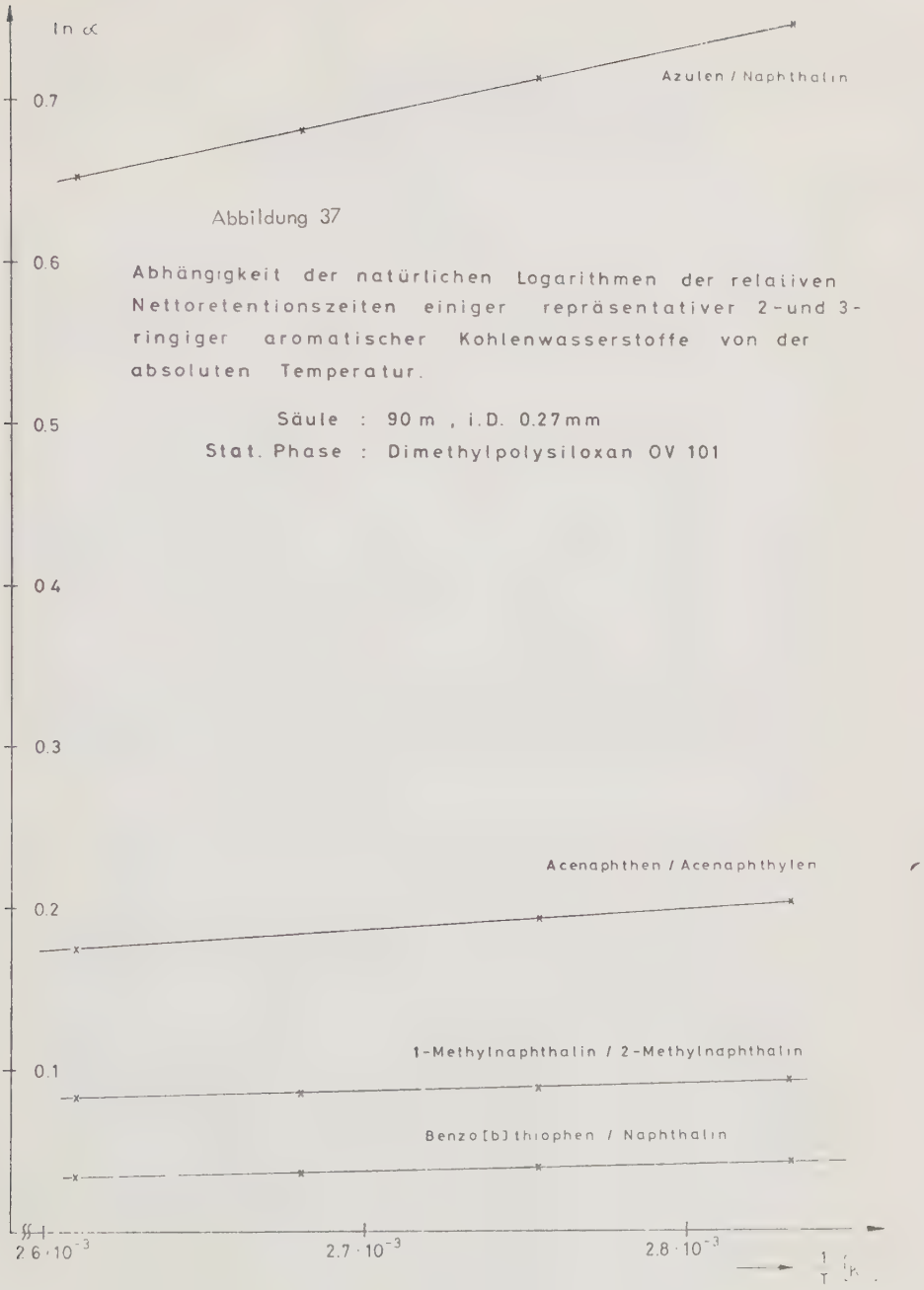


Abbildung 37

Abhängigkeit der natürlichen Logarithmen der relativen Nettoretentionszeiten einiger repräsentativer 2-und 3-ringiger aromatischer Kohlenwasserstoffe von der absoluten Temperatur.

Säule : 90 m , i.D. 0.27mm
Stat. Phase : Dimethylpolysiloxan OV 101

Tabelle 33a:

Natürliche Logarithmen der relativen Nettoretentionszeiten von einigen repräsentativen zwei- und dreiringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen.

Gerät : Carlo Erba 2130 Stat. Phase : Dimethylpolysiloxan OV 101

Säule : H 778 b; 90 m; i.D. 0,27 mm Totzeitbestimmung: Methan

Verbindungen:	T = 80 °C $\frac{1}{T} = 2.8317 \cdot 10^{-3} K^{-1}$	T = 90 °C $\frac{1}{T} = 2.7537 \cdot 10^{-3} K^{-1}$	T = 100 °C $\frac{1}{T} = 2.6799 \cdot 10^{-3} K^{-1}$	T = 110 °C $\frac{1}{T} = 2.6099 \cdot 10^{-3} K^{-1}$
Benzo[b]thiophen/ Naphthalin	0.04325 ± 0.00067	0.04038 ± 0.00063	0.03690 ± 0.00092	0.03489 ± 0.00016
Azulen/Naphthalin	0.7480 ± 0.0020	0.71476 ± 0.00050	0.68231 ± 0.00037	0.65290 ± 0.00030
1-Me-Naphthalin/ 2-Me-Naphthalin	0.0938 ± 0.0018	0.08823 ± 0.00023	0.08592 ± 0.00025	0.08410 ± 0.00064
Acenaphthen/ Acenaphthylen	0.20346 ± 0.00058	0.19381 ± 0.00036		0.17534 ± 0.00042

Verbindungen:	Gleichung	Korrel. Koeffizient
Benzo[b]thiophen/ Naphthalin	$\ln \alpha = 38.68 \cdot \frac{1}{T} - 0.066$	0.996
Azulen/Naphthalin	$\ln \alpha = 429.9 \cdot \frac{1}{T} - 0.47$	0.99997
1-Me-Naphthalin/ 2-Me-Naphthalin	$\ln \alpha = 42.74 \cdot \frac{1}{T} - 0.028$	0.969
Acenaphthen/ Acenaphtylen	$\ln \alpha = 127.0 \cdot \frac{1}{T} - 0.16$	0.99995

Tabelle 33 b:

Chromatographisch ermittelte Differenzen ΔH_v von Verdampfungsenthalpien H_v von einigen repräsentativen zwei- und dreiringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen.

$$\Delta H_v = H_{v(1)} - H_{v(2)}$$

Verbindungen:	J/Mol	cal/Mol
Benzo[b]thiophen/ Naphthalin	321.6	76.84
Azulen/Naphthalin	357.4	854.0
1-Me-Naphthalin 2-Me-Naphthalin	355.4	84.90
Acenaphthen/ Acenaphthylen	1056	252.3

Tabelle 33 c:

Chromatographisch ermittelte Differenzen $\Delta\Delta S$ von Entropieänderungen ΔS von einigen repräsentativen zwei- und dreiringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen.

$$\Delta\Delta S = \Delta S_2 - \Delta S_1$$

Verbindungen:	$\frac{J}{K \cdot Mol}$	$\frac{cal}{K \cdot Mol}$
Benzo[b]thiophen/ Naphthalin	- 0.55	- 0.13
Azulen/Naphthalin	- 3.91	- 0.93
1-Me-Naphthalin/ 2-Me-Naphthalin	- 0.23	- 0.056
Acenaphthen/ Acenaphthylen	- 1.33	- 0.32

Abbildung 38 und Tabelle 34:

Relative Nettoretentionszeiten α von einigen dreiringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen und ihren Derivaten

Säule : 22 m, i.D. 0,27 mm, HCl-/H_2O-/HF-behandelt

Stat. Phase : Superox-4 (Polyäthylenglykol), Filmdicke 66 nm

Temperatur : 230 °C

Trägergas : Stickstoff, 0,11 m/sec

Tabelle 34

Peak-Nr.	Verbindung	M	S	W(95%)
1	Dibenzothiophen			
2	Phenanthren	1,000		
3	Anthracen	1,023	0,005	0,017
4	N-Äthylcarbazol	1,141	0,006	0,027
5	Benzo[h]chinolin	1,191	0,008	0,031
6	Acridin	1,26	0,02	0,07
7	Benzo[f]chinolin	1,48	0,01	0,04
8	9,10-Dihydroacridin	2,52	0,04	0.1
9	$n\text{-}C_{32}H_{66}$			
10	Carbazol	4,01	0,04	0,24

* Wiederholbarkeit mit Vertrauensniveau 95%

Abbildung 38:

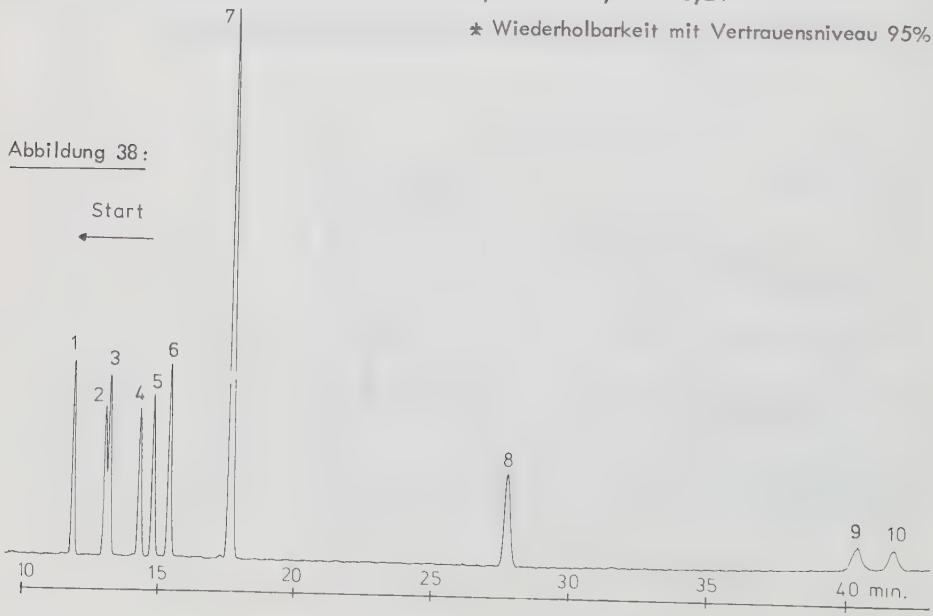


Abbildung 39 und Tabelle 35:

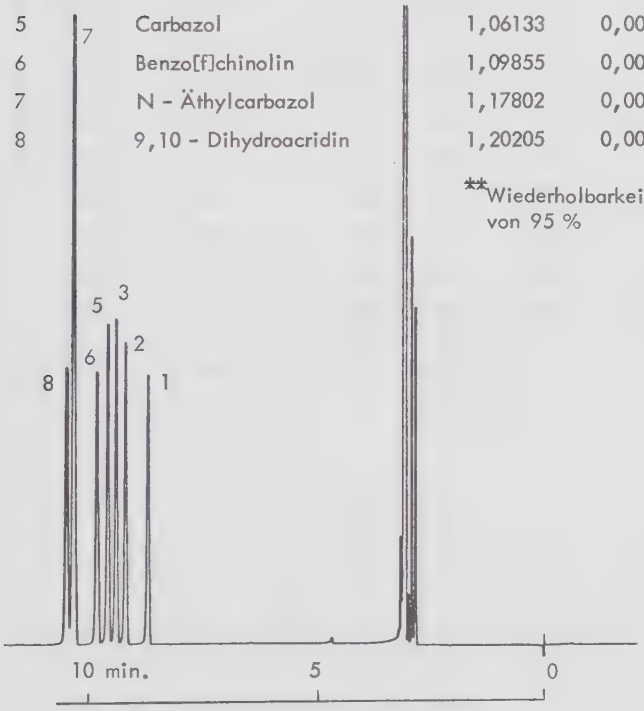
Relative Nettoretentionszeiten α von dreiringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen und ihren Derivaten

Säule	: 51 m, i.D. 0,27 mm
Stat. Phase	: Dimethylpolysiloxan OV 101
Filmdicke	: 550 nm
Temperatur	: 230 °C
Trägergas	: Wasserstoff, 0,35 m/sec

Tabelle 35:

Peak Nr.	Verbindungen	α M	S	W (95 %) **
1	Dibenzothiophen	0,92478	0,00021	0,00067
2	Phenanthren	1,000000		
3	Anthracen	1,03243	0,00015	0,00048
4	Acridin *	1,034457	0,00052	0,00018
5	Carbazol	1,06133	0,00041	0,001
6	Benzo[f]chinolin	1,09855	0,00033	0,0011
7	N - Äthylcarbazol	1,17802	0,00071	0,0023
8	9,10 - Dihydroacridin	1,20205	0,00080	0,0026

** Wiederholbarkeit mit Vertrauensniveau von 95 %



* Retentionsdaten getrennt bestimmt

Tabelle 36: (vergleiche Abbildungen 30 a und b)

Relative Nettoretentionszeiten α von dreiringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen und ihren Derivaten bei verschiedenen Temperaturen

Säule : 30 m, i.D. 0.27 mm HCl/H_2O/HF behandelt
Stat. Phase : Dexsil 400 (Methyl-Phenylpolycarboransiloxan)
Temperaturen: 170 °C und 190 °C
Trägergas : Wasserstoff 0.35 m/sec.

	170 °C			190 °C		
Verbindungen:	M	S	W (95%)	M	S	W (95%)
Dibenzothiophen	0.8859	0.0004	0.0013	0.8951	0.0002	0.0007
Phenanthren	1.0000	---	---	1.0000	---	---
Anthracen	1.0390	0.0004	0.0013	1.0366	0.0003	0.0010
Benzo[h]chinolin	1.0717	0.0006	0.0020	1.0625	0.0001	0.0003
Acridin	1.1316	0.0003	0.0010	1.1149	0.0002	0.0007
Benzo[f]chinolin	1.2890	0.0006	0.0020	1.2574	0.0005	0.002
Carbazol	1.2784	0.0005	0.0017	1.2350	0.006	0.02
N-Äthylcarbazol	1.4024	0.0008	0.0027	1.293	0.008	0.03
9,10-Dihydro-acridin	1.4302	0.0009	0.0030	1.331	0.009	0.03

Abbildung 40:

Trennung von isomeren, solvolyseempfindlichen Psoralenen bei verschiedenen Temperaturen

Säule : 22 m, i.D. 0,27 mm, HCl-/H_2O-/HF-behandelt

Stat. Phase : Superox-4 (Polyäthylenglykol)

Filmdicke : 66 nm

Temperaturen : 220 u. 270 °C

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

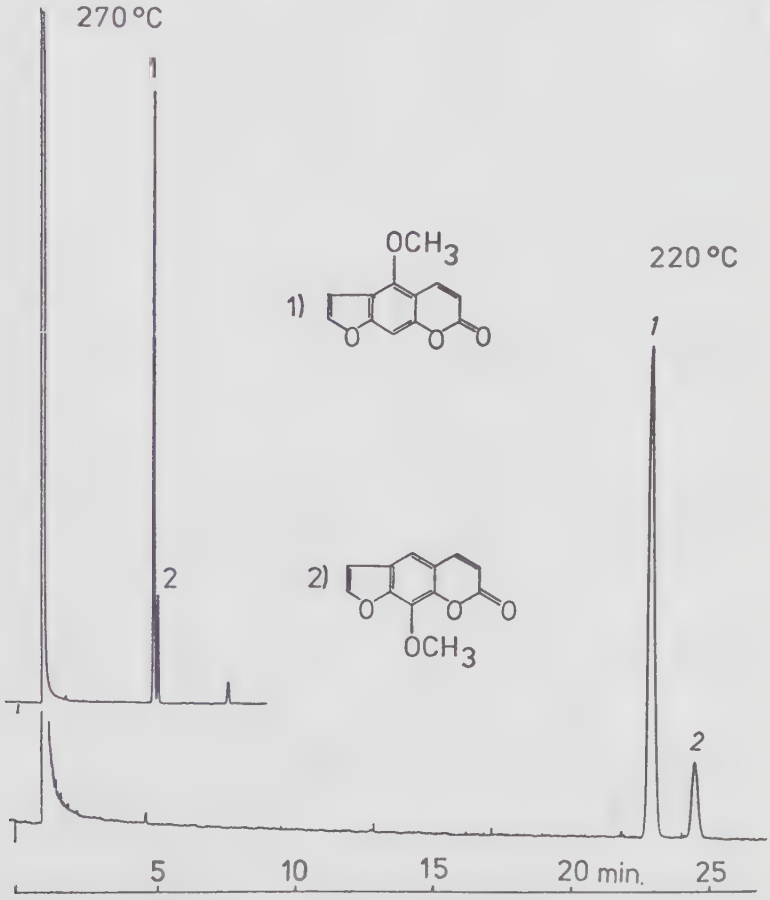


Abbildung 41 und Tabelle 37:

Abhängigkeit der natürlichen Logarithmen der relativen Nettoretentionszeiten α von isomeren Psoralenen von der reziproken Temperatur

T [°C]	1/T [K^{-1}]	α	ln α
270	0,001841	1,0332	0,03266
260	0,001876	1,0387	0,03797
250	0,001912	1,0451	0,04411
240	0,001949	1,0525	0,05117
230	0,001988	1,0635	0,06157
220	0,002028	1,0690	0,06672
210	0,002070	1,0784	0,07548
200	0,002114	1,0864	0,08287

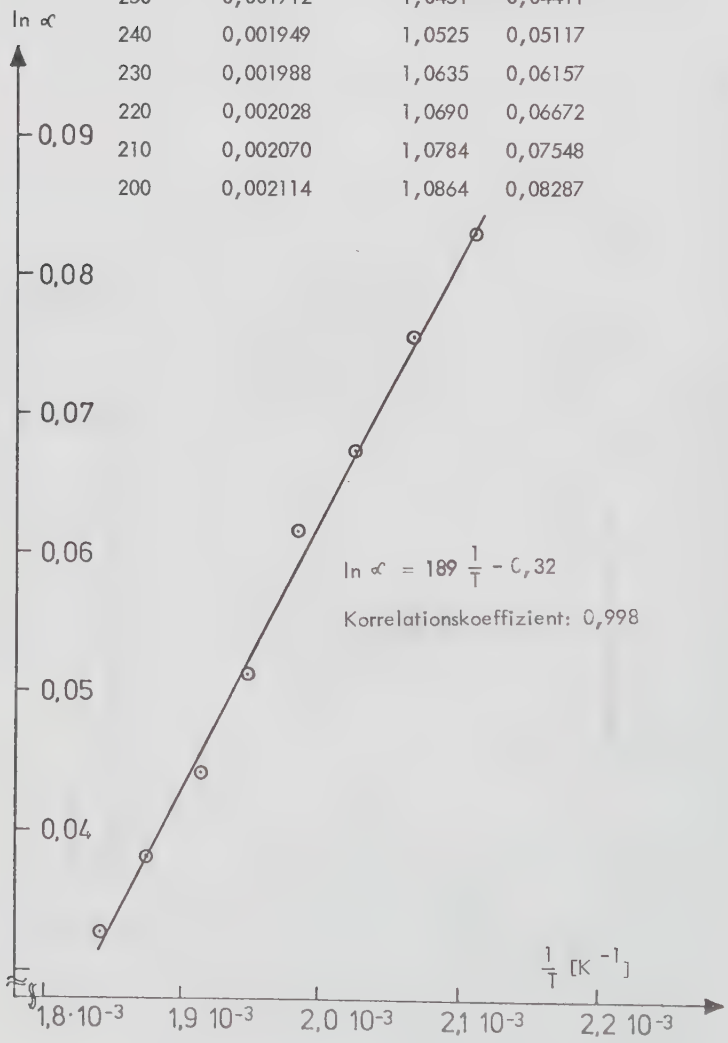


Tabelle 38: Überprüfung der Selektivität von diversen stationären Flüssigkeiten für die Trennung Benzo[b]-/-[c]fluoren und Chrysen/Triphenylen mit Glaskapillaren

$50\,000 \leq n_{theo} \leq 100\,000$ bei $k' \geq 5$

Benzo[b]-/-[c]fluoren		Chrysen/Triphenylen	
Stat. Phase	Trennung	Stat. Phase	Trennung
$C_{87}H_{176}$	-	$C_{87}H_{176}$	-
Apiezon L	-	Apiezon L	-
SE 30	-	SE 30	-
OV 101	-	OV 101	-
SE 52	-	SE 52	-
SE 54	-	SE 54	-
OV 3	-	OV 3	-
Dexsil 300	+	Dexsil 300	(+)
Dexsil 400	+	Dexsil 400	(+)
OV 7	-	OV 7	-
Dexsil 410	+	Dexsil 410	+
OV 61	+	OV 61	-
OV 17	+	OV 17	-
OV 22	+	OV 22	-
OV 25	+	OV 25	-
OV 225	+	OV 225	mangelhafte Temperaturstabilität
PPE 20	++	PPE 20	++
Carbowax 20 M	+	Carbowax 20 M	+
Poly S 179	-	Poly S 179	+
BBBT *	(+)	BBBT	++

ansteigende Polarität

bezogen auf die Rohrschneider - Konstanten von Benzol

\- keine Trennung + gute Trennung

(+) knappe Trennung ++ sehr gute Trennung

* 13 m lange Kapillare mit $n_{theo} = 18\,000$ bei $k' \geq 5$

Abbildung 42 :

Trennung von isomeren $C_{17}H_{12}$- und $C_{18}H_{12}$- polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen auf stationären Flüssigkeiten unterschiedlicher Polarität

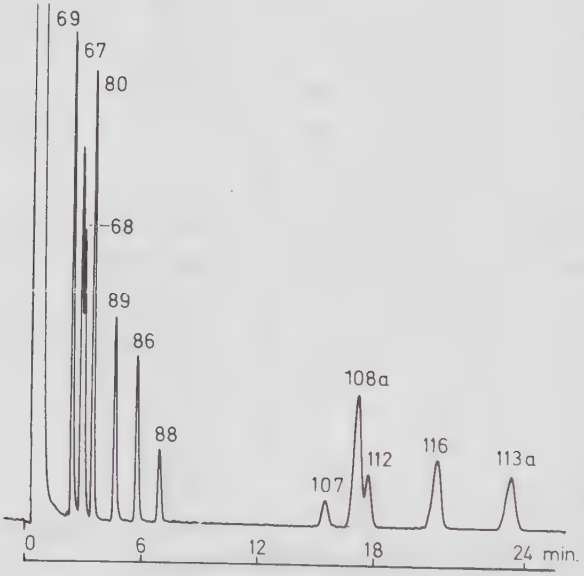
a) Stat. Phase: H_9C_4-O- -CH=N- -CH_2-CH_2- -N=CH- -O-C_4H_9

Säule : 9 m, i.D. 0,27 mm

Filmdicke : 160 nm

Temperatur : 251 °C

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec



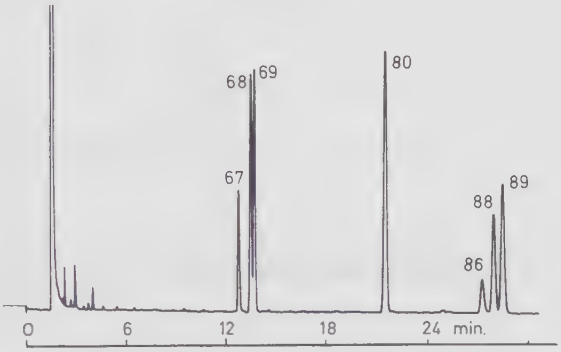
Zuordnung :

67) Benzo[a]fluoren
68) Benzo[b]fluoren
69) Benzo[c]fluoren
80) Benzo[c]phenanthren
86) Benzo[a]anthracen
88) Chrysen
89) Triphenylen
107) Benzo[b]fluoranthen
108a) Benzo[k]fluoranthen
112) Benzo[e]pyren
113a) Benzo[a]pyren
116) Perylen

Abbildung 42 :

Trennung von isomeren $C_{17}H_{12}$- und $C_{18}H_{12}$-polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen auf stationären Flüssigkeiten unterschiedlicher Polarität

b) Stationäre Phase : Dexsil 410 (Methyl - /Cyanoäthylpolycyrboransiloxan)
Filmdicke : 170 nm
Temperatur : 210 °C
Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec



Zuordnung

67) Benzo[a]fluoren
68) Benzo[b]fluoren
69) Benzo[c]fluoren
80) Benzo[c]phenanthren
86) Benzo[a]anthracen
88) Chrysen
89) Triphenylen

Abbildung 42 c: Trennung von $C_{17}H_{12}$ und $C_{18}H_{12}$ polyccyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen

Säule : 30 m, i.D. 0,27 mm
Temperatur: 270 °C

Stat. Phase: PPE 20 (Polyphenyläther), Filmdicke 300 nm
Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

Zuordnung:

67) Benzo[a]fluoren
68) Benzo[b]fluoren
69) Benzo[c]fluoren
80) Benzo[c]phenanthren
86) Benzo[a]anthracen
88) Chrysen
89) Triphenylen

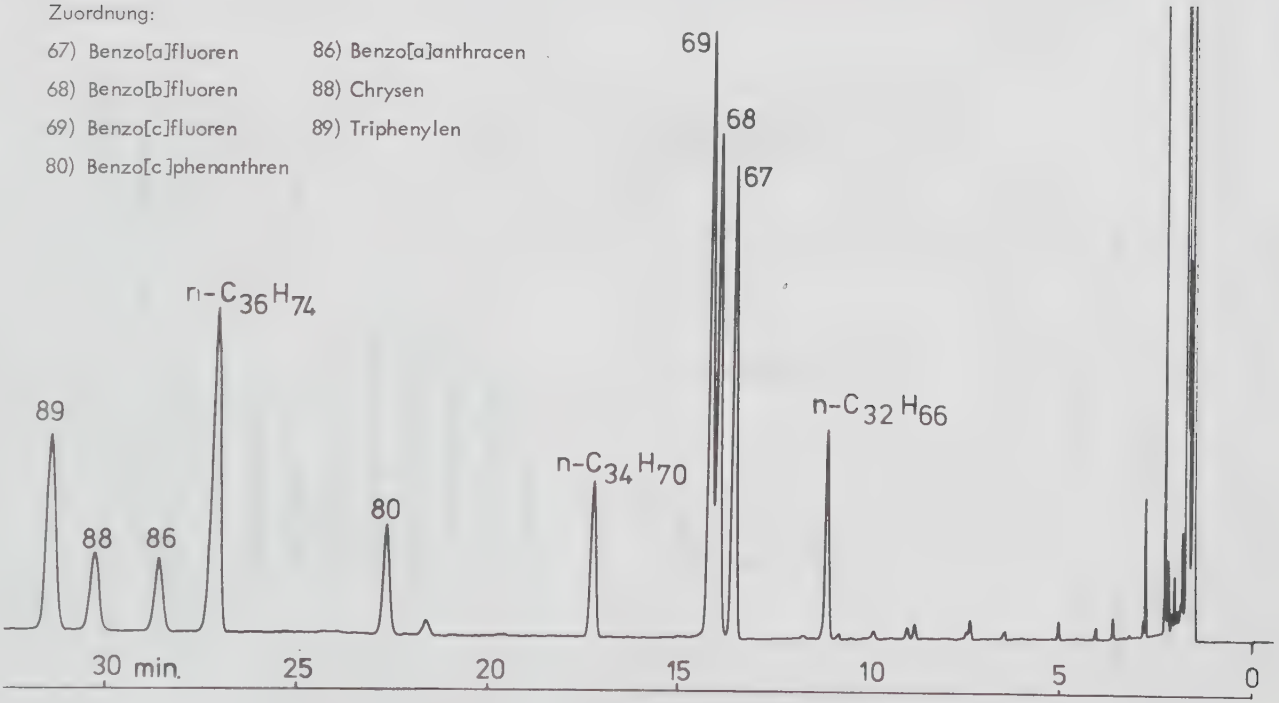


Tabelle 39:

Relative Nettoretentionszeiten $\mathcal{L}$ von einigen 4 - 6 ringigen isomeren aromatischen Kohlenwasserstoffen in einer Steinkohlenteermatrix

Säulen : ca 30 m, i.D. 0,27 mm

Stat. Flüssigkeiten: Methyl-/Phenylpolysiloxane

Temperatur : jeweils 250 °C

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

Isomerenpaar	SE 30			OV 101			SE 52		
	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)
Fluoranthen/ Pyren	1,145	0,003	0,009	1,154	0,002	0,007	1,182	0,004	0,01
Benzo[a]fluoren/ Benzo[b]fluoren*	1,0429	0,0006	0,002	1,0450	0,0006	0,002	1,0462	0,0008	0,003
Benzo[a]anthracen/ Chrysen**	1,0217	0,0007	0,002	1,0220	0,0003	0,0009	1,0396	0,0009	0,003
Benzo[b]fluoranthen/ Benzo[j]fluoranthen							1,0203	0,0006	0,002
Benzo[j]fluoranthen/ Benzo[k]fluoranthen							1,031	0,001	0,004
Benzofluoranthene***	1,0102	0,0008	0,003	1,0128	0,0003	0,001			
Benzo[e]pyren/ Benzo[a]pyren	1,032	0,002	0,007	1,0297	0,0007	0,002	1,069	0,001	0,004
Benzo[a]pyren/ Perylen	1,044	0,002	0,008	1,0510	0,0006	0,002	1,0389	0,0007	0,002
Indeno[1,2,3-c,d]pyren Benzo[g,h,i]perylen	1,044	0,002	0,008	1,0510	0,0006	0,002	1,0389	0,0007	0,002
Benzo[g,h,i]perylen Anthanthren	1,066	0,001	0,003	1,075	0,009	0,03			

* mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren ** mit ca. 30 % Triphenylen

*** Auftrennung der Benzofluoranthene in nur 2 Peaks

Tabelle 39, Fortsetzung:

Relative Nettorentionszeiten α von einigen 4 - 6 ringigen isomeren aromatischen Kohlenwasserstoffen in einer Steinkohlenteermatrix

Säulen : ca 30 m, i.D. 0,27 mm

Stat. Flüssigkeiten: Methyl-/Phenylpolysiloxane

Temperatur : 250 °C

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

Isomerenpaar	OV 3			OV 7			OV 61		
	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)	M	S	W(95)
Fluoranthen/ Pyren	1,175	0,002	0,006	1,172	0,015	0,05	1,21	0,01	0,04
Benzo[a]fluoren/ Benzo[b]fluoren *	1,0428	0,0004	0,001	1,042	0,005	0,02	1,031	0,001	0,004
Benzo[a]anthracen/ Chrysen **	1,0305	0,0002	0,0006	1,041	0,002	0,007	1,059	0,001	0,004
Benzo[b]fluoranthen/ Benzo[j]fluoranthen							1,0203	0,0004	0,001
Benzo[j]fluoranthen/ Benzo[k]fluoranthen							1,0173	0,0003	0,001
Benzofluoranthene ***	1,014	0,001	0,003	1,0188	0,0004	0,001			
Benzo[e]pyren/ Benzo[a]pyren	1,0339	0,0006	0,002	1,0368	0,0009	0,003	1,0381	0,0006	0,002
Benzo[a]pyren/ Perylen	1,0589	0,0009	0,003	1,0693	0,0025	0,008	1,0805	0,0007	0,002
Indeno[1,2,3-c,d]pyren/ Benzo[g,h,i]perylen	1,1500	0,0009	0,003	1,172	0,002	0,007	1,198	0,002	0,007
Benzo[g,h,i]perylen/ Anthanthren	1,0799	0,0009	0,003						

* mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren

** mit ca. 30 % Triphenylen

*** Auftrennung der Benzofluoranthene in nur 2 Peaks

SE 30 Dimethylpolysiloxan

OV101 Dimethylpolysiloxan

SE 52 Methyl-/Phenylpolysiloxan (95 : 5)

OV 3 Methyl-/Phenylpolysiloxan (90 : 10)

OV 7 Methyl-/Phenylpolysiloxan (80 : 20)

OV 61 Methyl-/Phenylpolysiloxan (67 : 33)

Abbildung 43: Trennung von 4 - 6ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen

Säule : 30 m, i.D. 0,27 mm

Stat. Flüssigkeit : OV 61 (Methyl-/Phenylpolysiloxan

Temperatur : 250 °C

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

Zuordnung

44) 4 H-Cyclopenta[d,e,f]-phenanthren	53) Fluoranthen	60) Pyren
80) Benzo[c]phenanthren	86) Benzo[a]anthracen	88) Chrysen
107) Benzo[b]fluoranthen	108a) Benzo[k]fluorananthen	108b) Benzo[j]fluoranthen
110) $C_{20}H_{12}$ - Isomer	112) Benzo[e]pyren	113a) Benzo[a]pyren
116) Perylen	130) Indeno[1,2,3-c,d]-pyren	134) Benzo[g,h,i]perylen
135) Anthanthren		

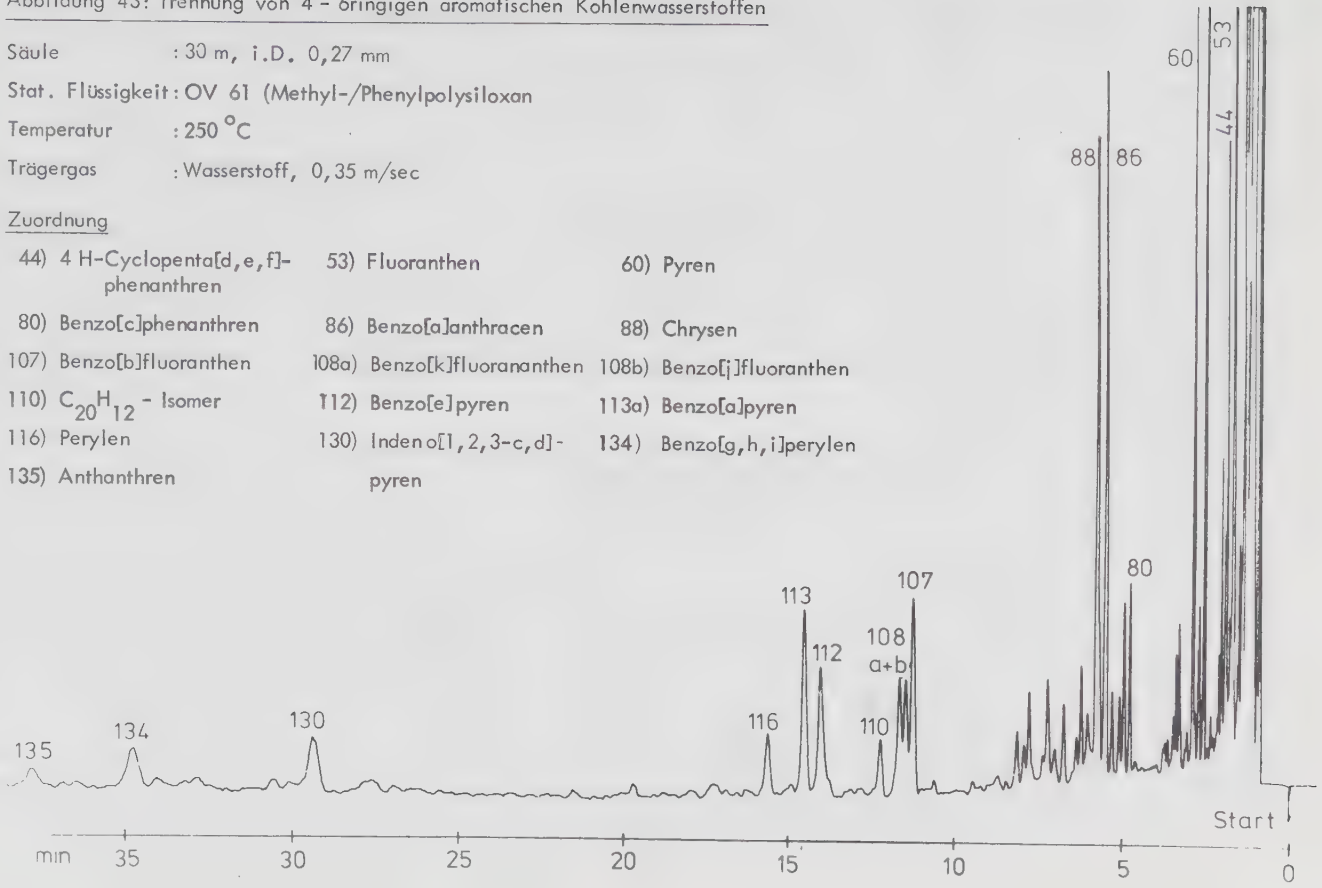


Tabelle 40:

Vergleich der relativen Nettoretentionszeiten α von einigen 4 - 6ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen

Stationäre Flüssigkeit : Dimethylpolysiloxan OV 101

Temperatur : 270 °C

Verbindung	α Grimmer et al.[29] (*)	α vorliegende Arbeit (**)	
		M	S
Benzo[a]anthracen	0,396	0,4095	0,0005
Chrysen	0,405	0,4176***	0,0004
Triphenylen	0,404		
Benzo[e]pyren	0,927	0,9304	0,0003
Benzo[a]pyren	0,955	0,9565	0,0004
Perylen	1,000	1,0000	
Indeno[1,2,3-c,d]pyren	1,817	1,8027	0,0024
Benzo[g,h,i]Perylen	2,025	2,0353	0,0029
Anthanthren	2,171	2,1732	0,0045

*) Testmischung

**) Steinkohlenteermatrix

***) mit ca. 30 % Triphenylen

Tabelle 41:

Relative Nettoretentionszeiten α und Differenzen $\Delta\Delta G$ der Freien Verdampfungsenthalpien von einigen 4 - 6 ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen

Säule : 48 m, i.D. 0,27 mm
Stat. Flüssigkeit : SE 52 (Methyl-/Phenylpolysilxoan)
Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec
Totzeitbestimmung : durch Methandosierung

Isomerenpaar	Säulentemperatur 240 °C			
	α		$\Delta\Delta$ G [J/Mol]	
	M	S	M	S
Fluoranthen / Pyren	1,1820	0,0003	713,4	1,1
Benzo[a] - / Benzo[b]fluoren *	1,0468	0,0001	195,1	0,4
Benzo[c]phenanthren/Benzo[a]anthracen	1,1851	0,0004	724,6	1,4
Benzo[a]anthracen/Chrysen **	1,0411	0,0002	171,8	0,8
Benzo[b] - / Benzo[j]fluoranthen	1,0222	0,0003	93,7	1,3
Benzo[j] - / Benzo[k]fluoranthen	1,0342	0,0002	143,5	0,8
Benzo[e]pyren / Benzo[a]pyren	1,0730	0,0005	300,6	2,0
Benzo[a]pyren / Perylen	1,0417	0,0003	174,3	1,2
	Säulentemperatur 250 °C			
Fluoranthen/Pyren	1,182	0,004	727	15
Benzo[a] - / Benzo[b]fluoren *	1,0462	0,0008	196,4	3,3
Benzo[c]phenanthren / Benzo[a]anthracen	1,180	0,004	720	15
Benzo[a]anthracen / Chrysen **	1,0396	0,0009	168,9	3,8
Benzo[b] - / Benzo[j]fluoranthen	1,0203	0,0006	87,4	2,6
Benzo[j] - / Benzo[k]fluoranthen	1,031	0,001	132,8	4,2
Benzo[e]pyren / Benzo[a]pyren	1,069	0,001	290,2	4,1
Benzo[a]pyren / Perylen	1,0389	0,0007	166,0	2,9
Indeno[1,2,3-c,d]pyren/Benzo[g,h,i]perylen	1,0885	0,0015	368,9	6,0

*) mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren **) mit ca. 30 % Triphenylen

Tabelle 41, Fortsetzung

Relative Nettoretentionszeiten α und Differenzen $\Delta\Delta G$ der Freien Verdampfungsenthalpien von einigen 4 - 6ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen

Säule : 48 m, i.D. 0,27 mm
Stat. Flüssigkeit : SE 52 (Methyl-/Phenylpolysiloxan)
Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec
Totzeitbestimmung : durch Methandosierung

	Säulentemperatur 260 °C			
Isomerenpaar	α		$\Delta\Delta G$ [J / Mol]	
	M	S	M	S
Benzo[a] - / Benzo[b]fluoren *	1,0431	0,0006	187,0	2,5
Benzo[c]phenanthren / Benzo[a]anthracen	1,171	0,001	699,7	3,8
Benzo[a]anthracen / Chrysen **	1,0373	0,0007	162,3	3,0
Benzo[b]- / Benzo[j]fluoranthen	1,0190	0,0003	83,4	1,3
Benzo[j] - / Benzo[k]fluoranthen	1,0253	0,0006	110,8	2,6
Benzo[e]pyren / Benzo[a]pyren	1,0630	0,0009	270,8	3,8
Benzo[a]pyren / Perylen	1,0395	0,0005	171,7	2,1
Indeno[1,2,3-c,d]pyren/Benzo[g,h,i]perylen	1,0923	0,0007	391,3	2,8
	Säulentemperatur 270 °C			
Fluoranthen / Pyren	1,17	0,001	709,0	5,4
Benzo[a]- / Benzo[b]fluoren *	1,0422	0,0002	186,7	0,9
Benzo[c]phenanthren / Benzo[a]anthracen	1,1661	0,0007	693,9	2,7
Benzo[a]anthracen / Chrysen **	1,0365	0,0004	161,9	1,7
Benzo[b] - / Benzo[j]fluoranthen	1,0181	0,0001	81,0	0,4
Benzo[j] - / Benzo[k]fluoranthen	1,0222	0,0003	99,2	1,3
Benzo[e]pyren / Benzo[a]pyren	1,0592	0,0005	259,7	2,1
Benzo[a]pyren / Perylen	1,0380	0,0002	168,4	0,9
Indeno[1,2,3-c,d]pyren/Benzo[g,h,i]perylen	1,0961	0,0005	414,4	2,1
Benzo[g,h,i]perylen / Anthanthren	1,060	0,003	263,1	13

*) mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren **) mit ca. 30 % Triphenylen

Tabelle 42 a: Natürliche Logarithmen der relativen Nettoretentionszeiten α von einigen 4-6ringigen isomeren, aromatischen Kohlenwasserstoffen in einer Steinkohlenteermatrix in Abhängigkeit von der absoluten, reziproken Temperatur

Stationäre Flüssigkeit: SE 52

Isomerenpaar	T = 240 °C $\frac{1}{T} = 1{,}9487 \times 10^{-3}$	T = 250 °C $\frac{1}{T} = 1{,}9115 \times 10^{-3}$	T = 260 °C $\frac{1}{T} = 1{,}8756 \times 10^{-3}$	T = 270 °C $\frac{1}{T} = 1{,}8411 \times 10^{-3}$ [K^{-1}]
Fluoranthen / Pyren	0,1672 ± 0,0003	0,167 ± 0,003		0,157 ± 0,001
Benzo[a]fluoren / Benzo[b]fluoren*	0,04574 ± 0,0009	0,0452 ± 0,0008	0,0422 ± 0,0006	0,0413 ± 0,0002
Benzo[c]phenanthren/Benzo[a]anthracen	0,1698 ± 0,0003	0,166 ± 0,003	0,1579 ± 0,0009	0,1537 ± 0,0006
Benzo[a]anthracen / Chrysen**	0,0403 ± 0,0002	0,0388 ± 0,0009	0,0366 ± 0,0007	0,0358 ± 0,0004
Benzo[b]- / Benzo[j]fluoranthen	0,0220 ± 0,0003	0,0201 ± 0,0006	0,0188 ± 0,0003	0,0179 ± 0,0001
Benzo[j]- / Benzo[k]fluoranthen	0,0336 ± 0,0002	0,031 ± 0,001	0,0250 ± 0,0006	0,0220 ± 0,0003
Benzo[e]pyren / Benzo[a]pyren	0,0705 ± 0,0005	0,0667 ± 0,0009	0,0611 ± 0,0008	0,0575 ± 0,0005
Benzo[a]pyren / Perylen	0,0409 ± 0,0003	0,0382 ± 0,0007	0,0387 ± 0,0005	0,0373 ± 0,0002
Indeno[1,2,3-c,d]pyren / Benzo[g,h,i]perylen		0,0848 ± 0,0014	0,0883 ± 0,0006	0,0918 ± 0,0005

*) mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren

**) mit ca. 20 % Triphenylen

Isomerenpaar	Gleichung	Korrelationskoeffizient
Fluoranthen / Pyren	$\ln \alpha = 101{,}0 \times 1/T - 0{,}038$	0,996
Benzo[a]fluoren / Benzo[c]fluoren	$\ln \alpha = 45{,}5 \times 1/T - 0{,}04$	0,961
Benzo[c]phenanthren / Benzo[a]anthracen	$\ln \alpha = 157{,}9 \times 1/T - 0{,}14$	0,989
Benzo[a]anthracen / Chrysen**	$\ln \alpha = 43{,}8 \times 1/T - 0{,}05$	0,988
Benzo[b]- / Benzo[j]fluoranthen	$\ln \alpha = 38{,}0 \times 1/T - 0{,}05$	0,989
Benzo[j]- / Benzo[k]fluoranthen	$\ln \alpha = 113{,}7 \times 1/T - 0{,}19$	0,987
Benzo[e]pyren / Benzo[a]pyren	$\ln \alpha = 124{,}3 \times 1/T - 0{,}172$	0,996
Benzo[a]pyren / Perylen	$\ln \alpha = 28{,}8 \times 1/T - 0{,}02$	0,873
Indeno[1,2,3-c,d]pyren/Benzo[g,h,i]perylen	$\ln \alpha = -99{,}42 \times 1/T + 0{,}275$	0,9993

Tabelle 42 b: Gaschromatographisch ermittelte Differenzen ΔH_v von Verdampfungsenthalpien H_v von einigen 4-6ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen

Stationäre Flüssigkeit SE 52 $\quad \Delta H_v = H_{v(1)} - H_{v(2)}$

Isomerenpaar:	[J / Mol]	[cal / Mol]
Fluoranthen / Pyren	839,7	200,6
Benzo[a] - / Benzo[b]fluoren*	1312,8	90,4
Benzo[c]phenanthren / Benzo[a]anthracen	1312,8	313,7
Benzo[a]anthracen / Chrysen **	364,2	87,0
Benzo[b] - / -[j]fluoranthen	315,9	75,5
Benzo[j] - / -[k]fluoranthen	945,3	225,9
Benzo[e]pyren / Benzo[a]pyren	1033,5	246,9
Benzo[a]pyren / Perylen	239,5	57,2
Indeno[1,2,3-c,d]pyren/Benzo[g,h,i]perylen	826,6	197,5

Tabelle 42 c: Gaschromatographisch ermittelte Differenzen $\Delta\Delta S$ von Entropieänderungen ΔS von einigen 4-6ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen beim Wechsel von der stationären Flüssigkeit SE 52 in die mobile Phase (Wasserstoff)

$$\Delta\Delta S = \Delta S_2 - \Delta S_1$$

Isomerenpaar:	$\frac{J}{K\ Mol}$	$\frac{cal}{K\ Mol}$
Fluoranthen / Pyren	- 0,32	- 0,075
Benzo[a] - / Benzo[b]fluoren*	- 0,33	- 0,079
Benzo[c]phenanthren / Benzo[a]anthracen	- 1,16	- 0,28
Benzo[a]anthracen / Chrysen**	- 0,42	- 0,099
Benzo[b] / -[j]fluoranthen	- 0,42	- 0,099
Benzo[j] / -[k]fluoranthen	- 1,58	- 0,38
Benzo[e]pyren / Benzo[a]pyren	- 1,43	- 0,34
Benzo[a]pyren / Perylen	- 0,17	- 0,040
Indeno[1,2,3-c,d]pyren /Benzo[g,h,i]perylen	+ 2,29	+ 0,546

* mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren

mit ca. 30 % Triphenylen

Abbildung 44: Abhängigkeit der natürlichen Logarithmen der relativen Nettoretentionszeiten α von isomeren 4-ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen von der absoluten, reziproken Temperatur

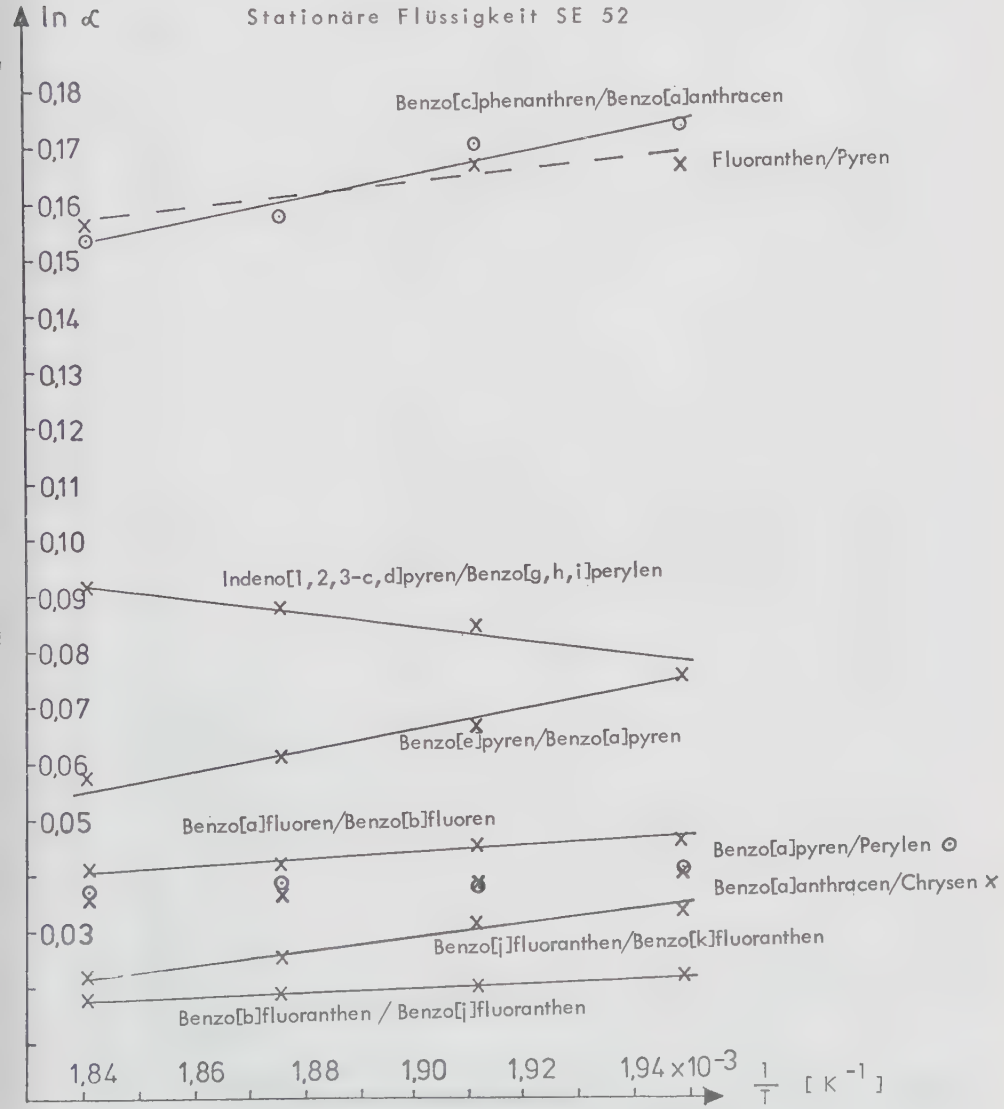


Abbildung 45

Trennung von 4 - 6ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen bei verschiedenen Elutionstemperaturen

a) Temperatur : 200 °C
Stationäre Flüssigkeit : SE 54 (Methyl-/Phenyl-/Vinylpolysiloxan)
Säule : 45 m, i.D. 0,27 mm
Filmdicke : 54 - 69 nm
Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

Zuordnung

53) Fluoranthen
60) Pyren
67) Benzo[a]fluoren
68) Benzo[b]fluoren
69) Benzo[c]fluoren
86) Benzo[a]anthracen
88) Chrysen
89) Triphenylen
107) Benzo[b]fluoranthen
108a) Benzo[j]fluoranthen
108b) Benzo[k]fluoranthen
110) $C_{20}H_{12}$-Isomer
112) Benzo[e]pyren
113a) Benzo[a]pyren
113b) ?
130) Indeno[1,2,3-c,d]pyren
134) Benzo[g,h,i]perylen
135) Anthanthren

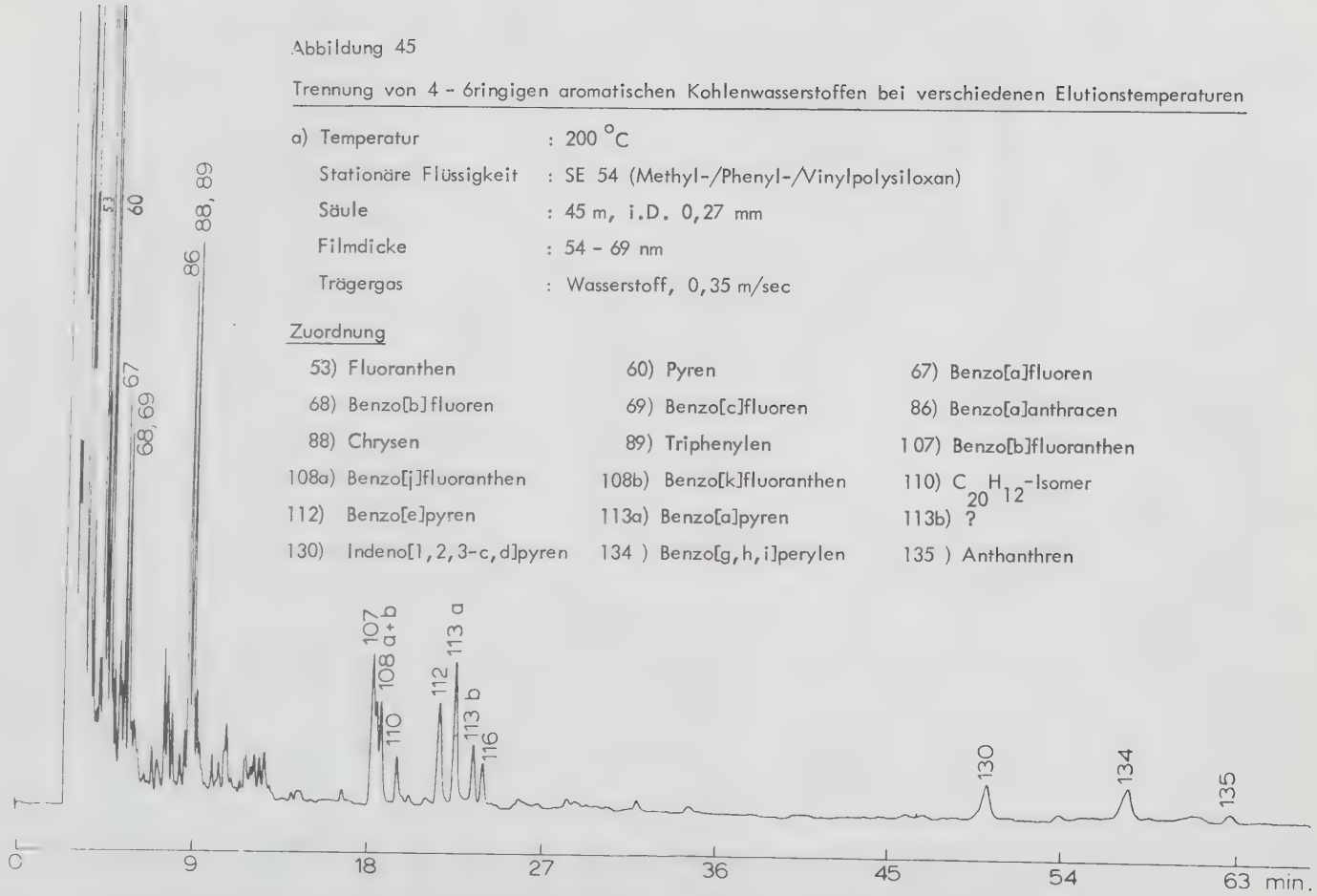


Abbildung 45 b - d:

Trennung von 4 - 6ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen bei verschiedenen Elutionstemperaturen

Temperaturen : jeweils angegeben

sonstige Bedingungen : siehe Abbildung 45 a

Zuordnung : siehe Abbildung 45 a

Abb. 45 b) 220 °C

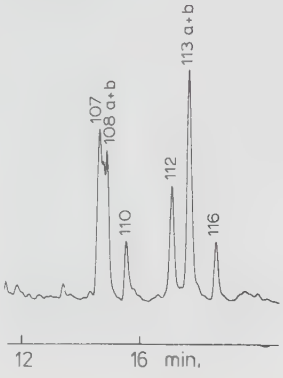


Abb. 45 c) 230 °C

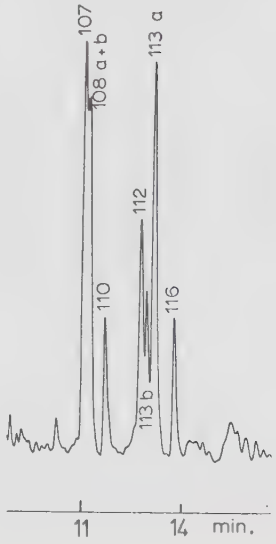


Abb. 45 d) 250 °C

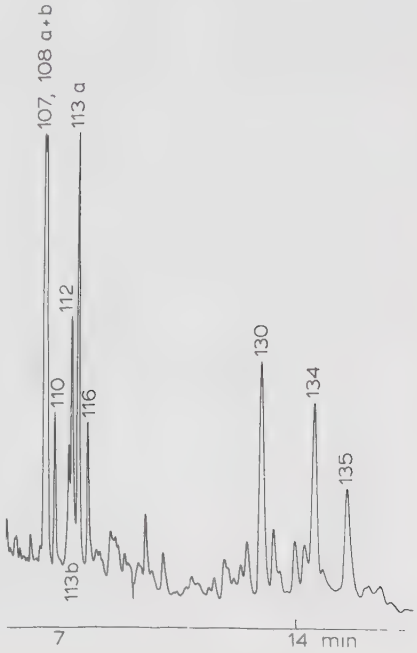


Abbildung 46:

Trennung von 4 - 6ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen in einer Steinkohlenteermatrix

Säule : 30 m, i.D. 0,27 mm

Stat. Flüssigkeit : Methyl - / Phenylpolycarboransiloxan

Temperatur : 250 °C

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

Zuordnung : 53) Fluoranthen, 60) Pyren, 67) Benzo[a]fluoren, 68) Benzo[b]fluoren, 80) Benzo[c]phenanthren
80) Benzo[c]phenanthren, 86) Benzo[a]anthracen, 88) Chrysen + ca. 20% Triphenylen
107,108) Benzofluoranthene, 112) Benzo[e]pyren, 113) Benzo[a]pyren, 116) Perylen
130) Indeno[1,2,3-c,d]pyren, 134) Benzo[g,h,i]perylen, 135) Anthanthren

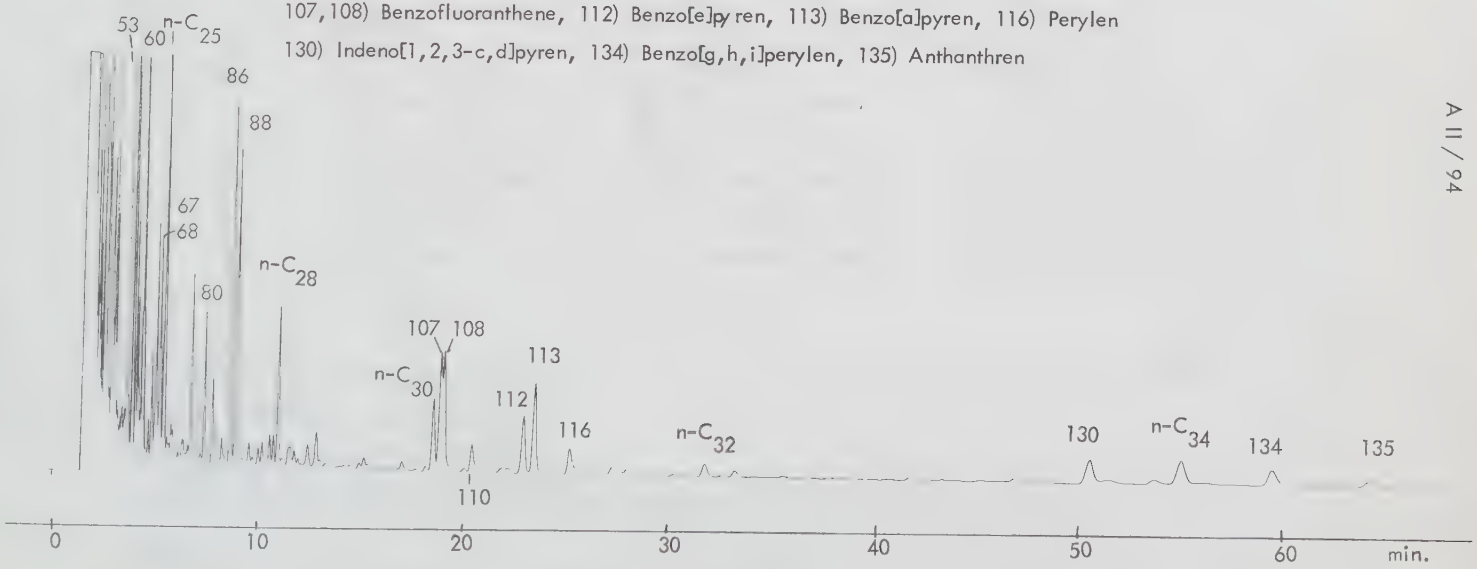


Tabelle 43:

Relative Nettoretentionszeiten α von einigen 4-6ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen in einer Steinkohlenteermatrix

Säulen : 50 m (Dexsil 300) und 30 m (Dexsil 400, 410), i.D. 0,27 mm

Stationäre Flüssigkeiten: Dexsil 300, Dexsil 400, Dexsil 410 (Polycarboransiloxane)

Temperatur : 250 °C

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

Isomerenpaar	Dexsil 300			Dexsil 400			Dexsil 410		
	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)
Fluoranthen/ Pyren	1,176	0,015	0,05	1,205	0,009	0,03	1,180	0,003	0,008
Benzo[a]fluoren/ Benzo[b]fluoren*	1,052	0,006	0,02	1,047	0,003	0,01	1,0535	0,0005	0,002
Benzo[c]phenanthren/ Benzo[a]anthracen				1,212	0,004	0,01	1,2423	0,0009	0,003
Benzo[a]anthracen/ Chrysen**	1,032	0,005	0,02	1,036	0,002	0,006	1,0266	0,0003	0,003
Benzofluoranthene***	keine Trennung			1,0091	0,0009	0,003	keine Trennung		
Benzo[e]pyren/ Benzo[a]pyren	1,0204	0,0005	0,002	1,0252	0,0008	0,002	1,021	0,001	0,004
Benzo[a]pyren/ Perylen	1,076	0,001	0,003	1,0786	0,0008	0,003	1,075	0,001	0,005
Indeno[1,2,3-c,d]pyren/ Benzo[g,h,i]perylen	1,179	0,001	0,005	1,1816	0,0006	0,002	1,168	0,002	0,005
Benzo[g,h,i]perylen/ Anthanthren	1,076	0,001	0,004	1,0821	0,0008	0,003	1,072	0,001	0,003

* mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren

** mit ca. 30 % Triphenylen

*** Auftrennung der Benzofluoranthene in nur 2 Peaks

Tabelle 44: Relative Nettoretentionszeiten von einigen 4-6ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen auf ausgewählten, nicht-silikonhaltigen stationären Phasen

Relative Nettoretentionszeiten α von einigen 4 - 6ringigen PAK - Isomeren auf ausgewählten nicht - silikonhaltigen stationären Flüssigkeiten

Proben : Testsubstanzen (nematische Phase BBBT) und Steinkohlenteer

Säulen : i.D. 0,27 mm (Alkaliglaskapillaren) und 0,32 mm (Duranglaskapillaren; Längen jeweils individuell angegeben

Temperaturen : jeweils 250 °C; bei nematischer Phase BBBT 251 °C

Trägergas : jeweils Wasserstoff, 0,35 m/sec

Isomerenpaar	$C_{87}H_{176}$			BBBT			Carbowax 20 M			PPE 20			Poly S 179		
	25 m Duranglas Filmdicke 150 nm			9 m Alkaliglas Filmdicke 160 nm			30 m Alkaliglas Filmdicke 82 nm			30 m Alkaliglas Filmdicke 230 nm			30 m Duranglas Filmdicke ?		
	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)
Fluoranthen / Pyren	1,218	0,009	0,03	nicht untersucht			1,2222	0,0006	0,002	1,284	0,007	0,002	1,283	0,001	0,004
Benzo[a]fluoren / Benzo[b]fluoren	1,033*	0,001	0,003	nicht getrennt			1,0485	0,0005	0,002	1,0367	0,0008	0,003	1,0495*	0,0004	0,001
Benzo[b]fluoren / Benzo[c]fluoren	nicht getrennt			0,80**	---	---	1,0426	0,0005	0,002	1,0161	0,0008	0,003	nicht getrennt		
Benzo[a]anthracen / Chrysen	1,0320"	0,0005	0,002	1,19	0,01	0,04	1,0528	0,0006	0,002	1,0637	0,0007	0,002	1,0640	0,0002	0,0006
Chrysen / Triphenylen	nicht getrennt			0,68	0,02	0,06	1,0205	0,0007	0,002	1,0447	0,0007	0,002	1,0226	0,0007	0,002
Benzo[b]fluoranthen / Benzo[k]fluoranthen	nicht getrennt			1,093	0,007	0,02	nicht mehr eluiert			nicht getrennt			1,0160""	0,0004	0,001
Benzo[e]pyren / Benzo[a]pyren	1,039	0,001	0,004	1,37	0,04	0,14	nicht mehr eluiert			1,014	0,002	0,006	1,0230	0,0006	0,002

*) mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren

**) Benzo[b]fluoren mit ca. 50 % Benzo[a]fluoren

") mit ca. 25 % Triphenylen

"") Auftrennung der Benzofluoranthene in nur 2 Peaks

Abbildung 47: Analyse von polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen auf einer polaren stationären Flüssigkeit

Probe	: Luftstaubextrakt
	Probennahme und -aufarbeitung Dr. Funcke, Aerobiologisches Institut Münster
Stationäre Flüssigkeit	: Poly S 179 (Polysulfonphenyläther)
Säule	: 30 m, i.D. 0,32 mm, Duran, HF-geätzt
Temperaturen	: 194 - 390 °C, 2 °C/min.
Trägergas	: Wasserstoff, 0,35 m/sec bei 390 °C
Zuordnung	: 16 Fluoren, 32 Dibenzothiophen, 34 Phenanthren, 53 Fluoranthen, 60 Pyren, 80 Benzo[c]phenanthren, 86 Benzo[a]anthracen, 88 Chrysen, 107 Benzo[b]fluoranthen, 108 Benzo[k]-,-[j]fluoranthen, 112 Benzo[e]pyren, 113 Benzo[a]pyren, 130 Indeno[1,2,3-c,d]pyren, 134 Benzo[g,h,i]perylen, 137 - 139 Dibenzofluoranthene, -pyrene, 141 Coronen

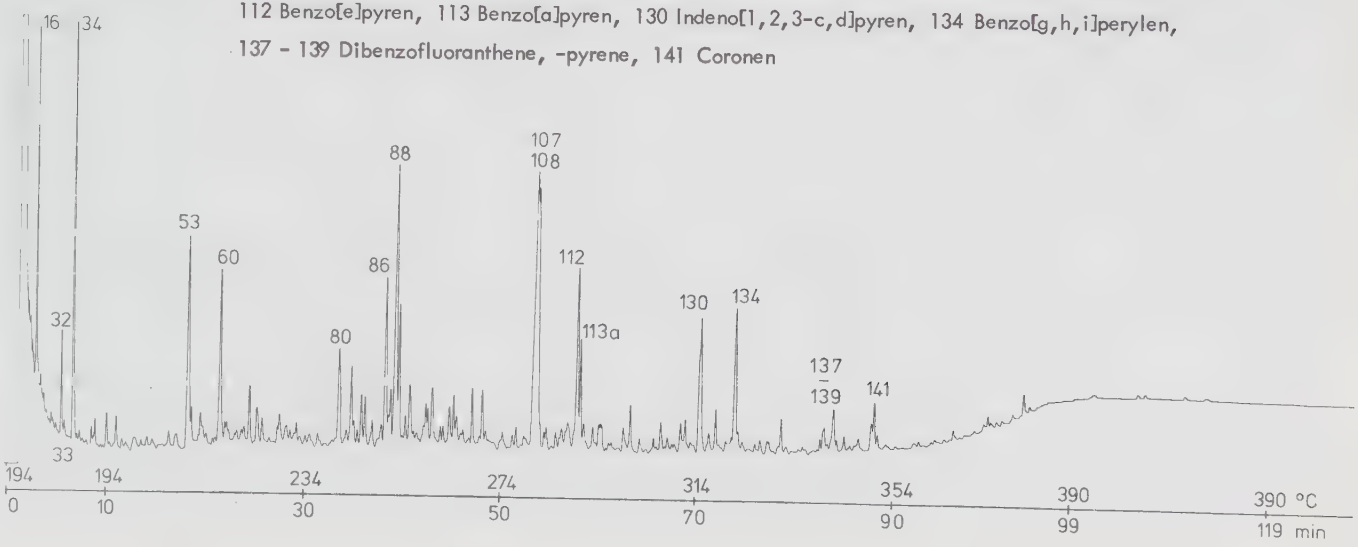


Tabelle 45: Relative Nettoretentionszeiten α und Differenzen $\Delta\Delta G$ der Freien Verdampfungsenthalpien von einigen 4-6ringigen isomeren aromatischen Kohlenwasserstoffen

Säule : 30 m, i.D. 0,32 mm, Duranglas, HF-geätzt
Stationäre Flüssigkeit : Poly S 179 Polysulfonphenyläther
Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec
Totzeitbestimmung : durch Methan bzw. Lösungsmittelanfang

Isomerenpaar	Säulentemperatur 250 °C			
	α		$\Delta\Delta G$ [J/Mol]	
	M	S	M	S
Fluoranthen / Pyren	1,283	0,001	1083,9	3,4
Benzo[a]-/Benzo[b]fluoren *	1,0495	0,0004	210,1	1,7
Benzo[c]phenanthren/Benzo[a]anthracen	1,3527	0,0009	1314,0	2,9
Benzo[a]anthracen / Chrysen	1,0640	0,0002	269,8	0,8
Chrysen / Triphenylen	1,0226	0,0007	97,2	3,0
Benzofluoranthene ***	1,0160	0,0004	69,0	1,7
Benzo[e]pyren / Benzo[a]pyren	1.0230	0.0006	98,9	2,6
Benzo[a]pyren / Perylen	1,152	0,001	615,8	3,8
Indeno[1,2,3-c,d]pyren/Benzo[g,h,i]perylen	1,276	0,002	1060,1	6,8
Benzo[g,h,i]perylen / Anthanthren	1,097	0,001	402,7	4,0
	Säulentemperatur 260 °C			
Fluoranthen / Pyren	1,2796	0,0007	1092,9	2,4
Benzo[a]fluoren/Benzo[b]fluoren *	1,0486	0,0003	210,4	1,3
Benzo[c]phenanthren / Benzo[a]anthracen	1,338	0,001	1290,7	3,6
Benzo[a]anthracen / Chrysen **	1,0628	0,0003	270,0	1,3
Benzofluoranthene ***	1,0143	0,0005	62,9	2,2
Benzo[e]pyren / Benzo[a]pyren	1,0235	0,0009	103,0	3,9
Benzo[a]pyren / Perylen	1,146	0,001	604,1	3,9
Indeno[1,2,3-c,d]pyren/Benzo[g,h,i]perylen	1,2723	0,0008	1067,5	2,8
Benzo[g,h,i]perylen/Anthanthren	1,107	0,001	450,6	4,0

*) mit ca. 30 % Triphenylen **) mit ca. 20 % Triphenylen

***) Trennung der Benzofluoranthene in nur zwei Peaks

Tabelle 45, Fortsetzung

Relative Nettoretentionszeiten α und Differenzen $\Delta\Delta G$ der Freien Verdampfungsenthalpien von einigen 4-6ringigen isomeren aromatischen Kohlenwasserstoffen

Säule : 30 m, i.D. 0,32 mm Duranglas, HF-geätzt
Stat. Flüssigkeit : Poly S 179 Polysulfonphenyläther
Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec
Totzeitbestimmung : durch Methan bzw. Lösungsmittelanfang

	Säulentemperatur 270 °C			
Isomerenpaar	α		$\Delta\Delta G$ [J/Mol]	
	M	S	M	S
Fluoranthen / Pyren	1,274	0,002	1093,6	7,1
Benzo[a]fluoren / Benzo[b]fluoren*	1,0480	0,0003	211,7	1,3
Benzo[c]phenanthren/Benzo[a]anthracen	1,325	0,001	1270,8	3,4
Benzo[a]anthracen / Chrysen	1,0617	0,0005	270,4	2,1
Chrysen / Triphenylen	1,0373	0,0006	165,4	2,6
Benzofluoranthene ***	1,012	0,002	53,9	8,9
Benzo[e]pyren / Benzo[a]pyren	1,0238	0,0008	106,2	3,5
Benzo[a]pyren / Perylen	1,1394	0,0009	589,3	3,6
Indeno[1,2,3-c,d]pyren/Benzo[g,h,i]perylen	1,267	0,001	1068,7	3,6
Benzo[g,h,i]perylen / Anthanthren	1,1044	0,0007	448,4	2,9
	Säulentemperatur 280 °C			
Fluoranthen / Pyren	1,271	0,001	1102,9	3,6
Benzo[a]fluoren / Benzo[b]fluoren*	1,0458	0,0003	206,0	1,3
Benzo[c]phenanthren / Benzo[a]anthracen	1,311	0,001	1245,4	3,5
Benzo[a]anthracen / Chrysen	1,0609	0,0004	271,9	1,7
Chrysen / Triphenylen	1,043	0,001	193,6	4,4
Benzofluoranthene ***	1,008	0,003	36,6	14
Benzo[e]pyren / Benzo[a]pyren	1,0237	0,0006	107,7	2,1
Benzo[a]pyren / Perylen	1,133	0,001	574,3	4,1
Indeno[1,2,3-c,d]pyren/Benzo[g,h,i]perylen	1,265	0,002	1081,1	7,3
Benzo[g,h,i]perylen / Anthanthren	1,101	0,001	442,5	4,2

*) Mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren

*** Antrennung der Benzofluoranthene in nur zwei Peaks

Tabelle 45, Fortsetzung

Relative Nettoretentionszeiten α und Differenzen $\Delta\Delta G$ der Freien Verdampfungsenthalpien von einigen 4-6ringigen, isomeren aromatischen Kohlenwasserstoffen

Säule	: 30 m, i.D. 0,27 mm, Duranglas, HF-geätzt
Stat. Flüssigkeit	: Poly S 179 Polysulfonphenyläther
Trägergas	: Wasserstoff, 0,35 m/sec
Totzeitbestimmung	: durch Methan bzw. Lösungsmittelanfang

Isomerenpaar	Säulentemperatur 290 °C			
	α		$\Delta\Delta G$ [J/Mol]	
	M	S	M	S
Fluoranthen / Pyren	1,267	0,001	1108,1	3,7
Benzo[a]fluoren / Benzo[b]fluoren *	1,0435	0,0003	199,4	1,3
Benzo[c]phenanthren / Benzo[a]anthracen	1,298	0,001	1221,2	3,6
Benzo[a]anthracen / Chrysen	1,0607	0,0008	275,9	3,5
Chrysen / Triphenylen	1,047	0,002	215,0	8,9
Benzo[e]pyren / Benzo[a]pyren	1,023	0,001	106,5	4,6
Benzo[a]pyren / Perylen	1,129	0,002	568,1	8,3
Indeno[1,2,3-c,d]pyren/Benzo[g,h,i]perylen	1,261	0,002	1085,8	7,4
	Säulentemperatur 300 °C			
Fluoranthen / Pyren	1,262	0,001	1108,9	3,8
Benzo[a]fluoren / Benzo[b]fluoren *	1,0419	0,0004	195,6	1,8
Benzo[c]phenanthren / Benzo[a]anthracen	1,285	0,001	1195,0	3,7
Benzo[a]anthracen / Chrysen **	1,059	0,001	273,2	4,5
Benzo[e]pyren / Benzo[a]pyren	1,022	0,002	103,7	9,3
Benzo[a]pyren / Perylen	1,124	0,002	537,0	8,5
Indeno[1,2,3-c,d]pyren/Benzo[g,h,i]perylen	1,258	0,002	1093,8	7,6
Benzo[g,h,i]perylen / Anthanthren	1,098	0,0002	445,5	9,4

*) mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren

**) mit ca. 20 % Triphenylen

Abbildung 48 : Analyse von polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen auf einer polaren stationären Flüssigkeit

Probe	: Steinkohlenteer
Stationäre Flüssigkeit	: Poly S 179 (Polysulfonphenyläther)
Säule	: 30 m, i.D. 0,27 mm, Duran HF-geätzt
Temperatur	: 250 °C
Trägergas	: Wasserstoff, 0,35 m/sec
Zuordnung	: 53 Fluoranthen, 60 Pyren, 67 Benzo[a]fluoren, 68 Benzo[b]-,-[c]fluoren 80 Benzo[c]phenanthren, 86 Benzo[a]anthracen, 88 Chrysen, 89 Triphenylen 107 Benzo[b]fluoranthen, 108 Benzo[k]-,-[j]fluoranthen, 110 $C_{20}H_{12}$-Isomer 112 Benzo[e]pyren, 113a Benzo[a]pyren, 116 Perylen

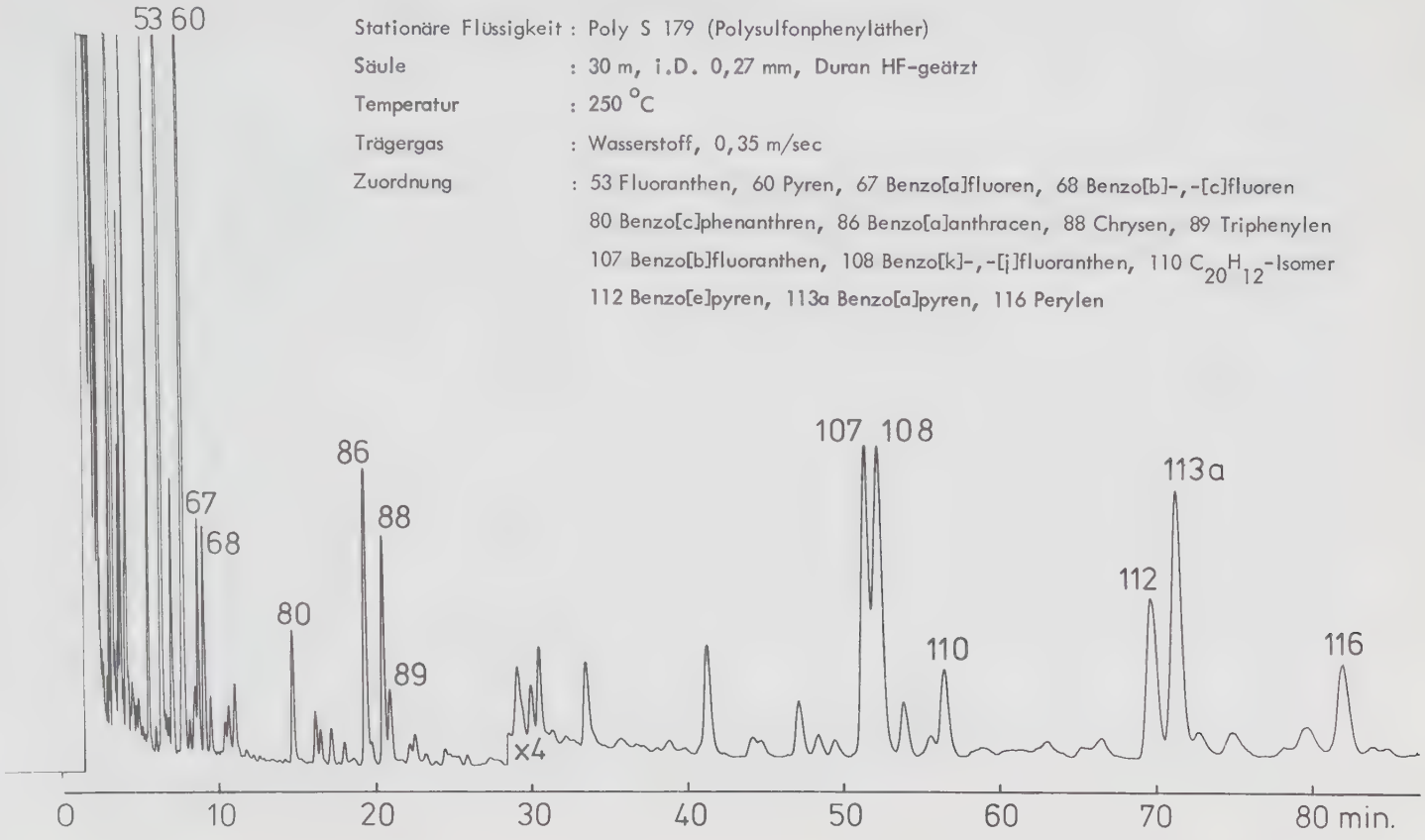


Abbildung 48, Forsetzung

Analyse von polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen auf einer polaren stationären Flüssigkeit

Probe	: Steinkohlenteer
Stationäre Flüssigkeit	: Poly S 179 (Polysulfonphenyläther)
Säule	: 30 m, i.D. 0,27 mm, Duran, HF-geätzt
Temperatur	: 250 °C
Trägergas	: Wasserstoff, 0,35 m/sec
Zuordnung	: 130 Indeno[1,2,3-c,d]pyren, 134 Benzo[g,h,i]perylen, 135 Anthanthren

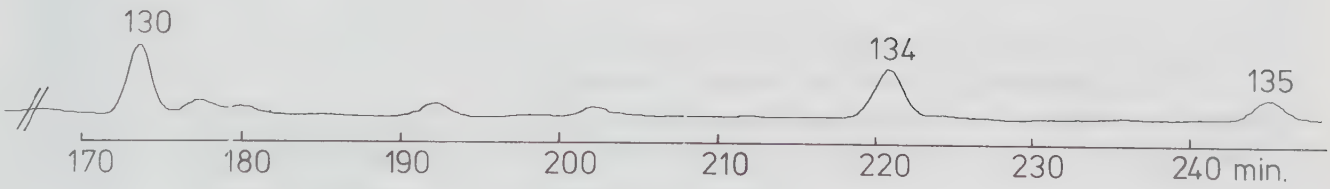


Abbildung 49:

Abhängigkeit der natürlichen Logarithmen der relativen Nettoretentionszeiten $\mathcal{L}$ von 4-6ringigen, isomeren aromatischen Kohlenwasserstoffen von der absoluten, reziproken Temperatur

Stationäre Flüssigkeit: Poly S 179 Polysulfonphenyläther

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

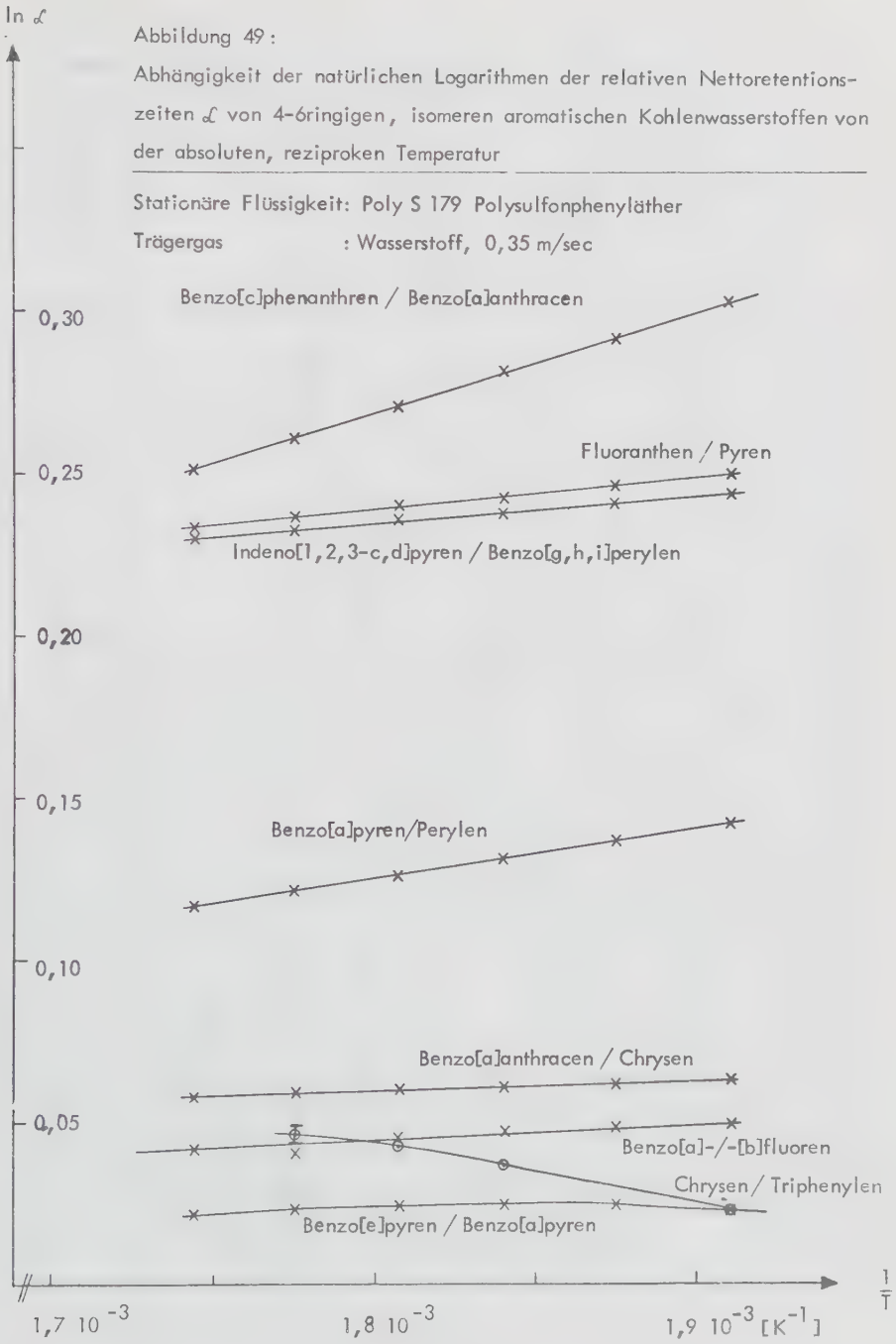


Tabelle 46a:

Natürliche Logarithmen der relativen Nettoreiten α von 4 - 6ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen in einer Steinkohlenteermatrix in Abhängigkeit von der absoluten, reziproken Temperatur

Stationäre Flüssigkeit: Poly S 179 (Polysulfonphenyläther)

Isomerenpaar	T = 250 °C $\frac{1}{T} = 1{,}9115 \times 10^{-3}$	T = 260 °C $\frac{1}{T} = 1{,}8756 \times 10^{-3}$	T = 270 °C $\frac{1}{T} = 1{,}8411 \times 10^{-3}$	T = 280 °C $\frac{1}{T} = 1{,}8078 \times 10^{-3}$	T = 290 °C $\frac{1}{T} = 1{,}7757 \times 10^{-3}$	T = 300 °C $\frac{1}{T} = 1{,}7447 \times 10^{-3}$
Fluoranthen / Pyren	0,2492 ± 0,0008	0,2465 ± 0,0005	0,242 ± 0,002	0,2398 ± 0,0008	0,2367 ± 0,0008	0,2327 ± 0,0008
Benzo[a]fluoren / Benzo[b]fluoren *	0,0483 ± 0,0004	0,0475 ± 0,0003	0,0469 ± 0,0003	0,0448 ± 0,0003	0,04 ± 0,01	0,0410 ± 0,0004
Benzo[c]phenanthren / Benzo[a]anthracen	0,3021 ± 0,0007	0,2912 ± 0,0007	0,2814 ± 0,0008	0,2708 ± 0,0008	0,2608 ± 0,0008	0,2506 ± 0,0008
Benzo[a]anthracen / Chrysen	0,0620 ± 0,0002	0,0609 **	0,0599 ± 0,0004	0,0591 ± 0,0004	0,0589 ± 0,0008	0,0573 ± 0,0009 **
Chrysen / Triphenylen	0,0223 ± 0,0007		0,0366 ± 0,0006	0,042 ± 0,001	0,046 ± 0,002	
Benzofluoranthene ***	0,0159 ± 0,0004	0,0142 ± 0,0005	0,0119 ± 0,0002	0,008 ± 0,003		
Benzo[e]pyren / Benzo[a]pyren	0,0227 ± 0,0006	0,0232 ± 0,0008	0,0235 ± 0,0008	0,0234 ± 0,0006	0,023 ± 0,001	0,022 ± 0,002
Benzo[a]pyren / Perylen	0,1415 ± 0,0009	0,1363 ± 0,0009	0,1305 ± 0,0008	0,1249 ± 0,0009	0,121 ± 0,002	0,117 ± 0,002
Indeno[1,2,3-c,d]pyren/Benzo[g,h,i]perylen	0,244 ± 0,002	0,2408 ± 0,0006	0,2367 ± 0,0008	0,235 ± 0,002	0,232 ± 0,002	0,230 ± 0,002
Benzo[g,h,i]perylen / Anthanthren	0,0926 ± 0,0009	0,1017 ± 0,0009	0,0993 ± 0,0006	0,0962 ± 0,0009	0,0962 ± 0,0008	0,0935 ± 0,002

*) mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren **) mit ca. 25 % Triphenylen ***) Trennung der Benzofluoranthene in nur zwei Peaks

Isomerenpaar	Gleichung	Korrelationskoeffizient	Legende
Fluoranthen/Pyren	$\ln \alpha = 97{,}68 \times \frac{1}{T} + 0{,}0628$	0,9963	
Benzo[a]fluoren / Benzo[b]fluoren *	$\ln \alpha = 52{,}1 \times \frac{1}{T} - 0{,}050$	0,928	*) mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren
Benzo[c]phenanthren / Benzo[a]anthracen	$\ln \alpha = 307{,}7 \times \frac{1}{T} - 0{,}2858$	0,99976	
Benzo[a]anthracen / Chrysen	$\ln \alpha = 25{,}96 \times \frac{1}{T} + 0{,}012$	0,985	
Chrysen / Triphenylen	nur 4 Messpunkte, nach denen sich - gestützt durch einen F-Test - eine Gleichung zweiten Grades andeutet		
Benzofluoranthene ***	$\ln \alpha = 75{,}0 \times \frac{1}{T} - 0{,}127$ 0,979	0,979	***) Trennung der Benzofluoranthene in nur zwei Peaks
Benzo[e]pyren / Benzo[a]pyren	$\ln \alpha = -166074 \times \left(\frac{1}{T}\right)^2 + 610{,}6 \times \frac{1}{T} - 0{,}538$	0,9885	
Benzo[a]pyren / Perylen	$\ln \alpha = 149{,}3 \times \frac{1}{T} - 0{,}144$	0,9983	
Indeno[1,2,3-c,d]pyren/Benzo[g,h,i]perylen	$\ln \alpha = 84{,}22 \times \frac{1}{T} - 0{,}0826$	0,9950	
Benzo[g,h,i]perylen / Anthanthren	Gleichung höheren Grades möglich		

Tabelle 46 b:

Chromatographisch ermittelte Differenzen ΔH_v von Verdampfungsenthalpien H_v von einigen 4 - 6ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen

Stationäre Flüssigkeit : Poly S 179 (Polysulfonphenyläther)

Isomerenpaar	$\Delta H_v = H_{v(1)} - H_{v(2)}$ [J / Mol]	[cal / Mol]
Fluoranthen / Pyren	812,1	194,0
Benzo[a]fluoren / Benzo[b]fluoren *	433,2	103,5
Benzo[c]phenanthren / Benzo[a]anthracen	2558,3	611,2
Benzo[a]anthracen / Chrysen	215,8	51,57
Benzofluoranthene ***	623,6	149,0
Benzo[a]pyren / Perylen	1241	296,6
Indeno[1,2,3-c,d]pyren/Benzo[g,h,i]perylen	700,2	167,3

Tabelle 46 c:

Chromatographisch ermitelte Differenzen $\Delta\Delta S$ von Entropieänderungen ΔS von einigen 4 - 6ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen beim Übergang von der stationären in die mobile Phase

Stationäre Flüssigkeit : Poly S 179 (Polysulfonphenyläther)

Isomerenpaar	$\Delta\Delta S = \Delta S_{(2)} - \Delta S_{(1)}$ $\left[\frac{J}{K\ Mol}\right]$	$\left[\frac{cal}{K\ Mol}\right]$
Fluoranthen / Pyren	0,522	0,125
Benzo[a]fluoren / Benzo[b]fluoren *	- 0,416	- 0,099
Benzo[c]phenanthren / Benzo[a]anthracen	- 2,376	- 0 568
Benzo[a]anthracen / Chrysen	0,0998	0,0238
Benzofluoranthene ***	- 1,056	- 0,252
Benzo[a]pyren / Perylen	- 1,197	- 0,286
Indeno[1,2,3-c,d]pyren / Benzo[g,h,i]perylen	- 0,687	- 0,164

* mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren

*** Trennung der Benzofluoranthene in nur zwei Peaks

Tabelle 47:

Relative Nettoretentionszeiten zur Identifizierung von polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen.

Stationäre Flüssigkeit	: Poly S 179 (Polysulfonphenyläther)
Temperaturen	: 250 °C - 300 °C
Trägergas	: Wasserstoff, 0,35 m/sec.
Bezugssubstanz	: Perylen
Totzeitbestimmung	: Methan

Verbindung:	250 °C			260 °C		
	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)
Dibenzothiophen	0,0190	0,0002	0,0006	0,0214	0,0002	0,0006
Phenanthren *)	0,0217	0,0002	0,0007	0,0244	0,0002	0,0005
4,5-Methylenphenanthren	0,0325	0,0003	0,0009	0,0360	0,0002	0,0005
Carbazol	0,0502	0,0003	0,0010	0,0545	0,0002	0,0007
Fluoranthen	0,0604	0,0004	0,0014	0,0657	0,0002	0,0007
Pyren	0,0775	0,0005	0,0020	0,0841	0,0002	0,0008
Benzo[a]fluoren	0,0894	0,0005	0,0020	0,0956	0,0003	0,0008
Benzo[b]fluoren **)	0,0938	0,0006	0,0020	0,1003	0,0003	0,0008
Benzo[c]phenanthren	0,1647	0,0009	0,0030	0,1736	0,0003	0,0010
Benzo[a]anthracen	0,223	0,001	0,003	0,2323	0,0003	0,0009
Chrysen	0,2367	0,0005	0,0015	0,2468	0,0003	0,0008 ***)
Triphenylen	0,242	0,001	0,004			
Benzo[b]fluoranthen	0,622	0,001	0,004	0,6292	0,0006	0,0020
Benzo[k]fluoranthen ****)	0,632	0,0015	0,005	0,6383	0,0007	0,0023
Benzo[e]pyren	0,8482	0,0008	0,003	0,8526	0,0004	0,0014
Benzo[a]pyren	0,8678	0,0009	0,003	0,8724	0,0006	0,0020
Perylen	1,000			1,000		
Indeno[1,2,3-c,d]pyren	2,144	0,0006	0,02	2,0940	0,0030	0,010
Benzo[g,h,i]perylen	2,73	0,02	0,06	2,664	0,003	0,010
Anthanthren	3,03	0,02	0,08	2,949	0,004	0,013

*) mit ca. 10 % Anthracen

**) mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren

***) mit ca. 25 % Triphenylen

****) Trennung der Benzofluoranthene in zwei Peaks

Tabelle 47, Fortsetzung:

Relative Nettoretentionszeiten zur Identifizierung von polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen.

Stationäre Flüssigkeit	: Poly S 179 (Polysulfonphenyläther)
Temperaturen	: 250 °C - 300 °C
Trägergas	: Wasserstoff, 0,35 m/sec.
Bezugssubstanz	: Perylen
Totzeitbestimmung	: Methan

Verbindung:	270 °C			280 °C		
	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)
Dibenzothiophen	0,0244	0,0005	0,0015	0,0273	0,0002	0,0008
Phenanthren *)	0,0274	0,0004	0,0012	0,0307	0,0002	0,0007
4,5-Methylenphenanthren	0,0400	0,0004	0,0012	0,0443	0,0002	0,0006
Carbazol	0,0591	0,0004	0,0012	0,0641	0,0002	0,0006
Fluoranthen	0,0713	0,0005	0,0015	0,0774	0,0002	0,0008
Pyren	0,0910	0,0003	0,0011	0,0984	0,0002	0,0006
Benzo[a]fluoren	0,1021	0,0004	0,0011	0,1090	0,0002	0,0005
Benzo[b]fluoren **)	0,1069	0,0003	0,0011	0,1140	0,0002	0,0005
Benzo[c]phenanthren	0,1823	0,0003	0,0010	0,1918	0,0002	0,0007
Benzo[a]anthracen	0,2416	0,0004	0,0012	0,2515	0,0003	0,0008
Chrysen	0,2565	0,0003	0,0010	0,2668	0,0003	0,0010
Triphenylen	0,2661	0,0004	0,0012	0,2782	0,0003	0,0009
Benzo[b]fluoranthen	0,6368	0,0006	0,0018	0,6455	0,002	0,006
Benzo[k]fluoranthen	0,6441	0,0008	0,0027	0,6507	0,001	0,004
Benzo[e]pyren	0,8573	0,0003	0,0010	0,8618	0,0005	0,002
Benzo[a]pyren	0,8776	0,0007	0,0022	0,8823	0,0008	0,003
Perylen	1,000			1,000		
Indeno[1,2,3-c,d]pyren	2,054	0,002	0,007	2,007	0,006	0,02
Benzo[g,h,i]perylen	2,603	0,003	0,010	2,54	0,01	0,03
Anthanthren	2,88	0,01	0,05	2,80	0,01	0,04

*) mit ca. 10 % Anthracen

**) mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren

Tabelle 47, Fortsetzung:

Relative Nettoretentionszeiten zur Identifizierung von polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen.

Stationäre Flüssigkeit : Poly S 179 (Polysulfonphenyläther)
Temperaturen : 250 °C - 300 °C
Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec.
Bezugssubstanz : Perylen
Totzeitbestimmung : Methan

Verbindung:	290 °C			300 °C		
	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)
Carbazol	0,0690	0,0002	0,0007	0,0748	0,0003	0,0008
Fluoranthen	0,0832	0,0003	0,0010	0,0900	0,0003	0,001
Pyren	0,1054	0,0003	0,0010	0,1135	0,0004	0,001
Benzo[a]fluoren	0,1155	0,0003	0,0009	0,1228	0,0004	0,001
Benzo[b]fluoren **)	0,1205	0,0003	0,0009	0,1279	0,0004	0,001
Benzo[c]phenanthren	0,2006	0,0003	0,0010	0,2104	0,0004	0,001
Benzo[a]anthracen	0,2602	0,0004	0,0014	0,2704	0,0004	0,001
Chrysen	0,2761	0,0006	0,0020	0,2863	0,0005	0,002 ***)
Triphenylen	0,2889	0,0005	0,0016			
Benzofluoranthen	0,654	0,002	0,005	0,660	0,001	0,004
Benzo[e]pyren	0,866	0,002	0,006	0,870	0,001	0,004
Benzo[a]pyren	0,886	0,002	0,006	0,889	0,002	0,006
Perylen	1,000			1,000		
Indeno[1,2,3-c,d]pyren	1,969	0,003	0,010	1,933	0,003	0,01
Benzo[g,h,i]perylen	2,48	0,01	0,04	2,433	0,002	0,008
Anthanthren	2,73	0,02	0,06	2,671	0,003	0,010

**) mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren

***) mit ca. 25 % Triphenylen

Tabelle 48a: Indexbestimmung nach Kovats mit verschieden bestimmten Totzeiten t_m

Totzeitbestimmung	t_m [sec]	Index von CH_4	Indexbestimmung durch Interpolation zwischen Homologen mit z und (z + 2) C-Atomen				
			z + 1 n - Nonan	z + 1 n - Dekan	z + 1 n - Undekan	z + 1 n - Dodekan	z + 1 n - Tridekan
CH_4	416,6	----	900,23	1000,30	1100,19	1200,18	1300,21
P + H *							
$C_7 / C_8 / C_9$	416,1	100,96	900,13	1000,26	1100,17	1200,17	1300,21
$C_8 / C_9 / C_{10}$	415,4	210,49	900,00	1000,19	1100,14	1200,16	1300,20
$C_9 / C_{10} / C_{11}$	413,1	335,14	899,59	1000,00	1100,05	1200,12	1300,18
$C_{10} / C_{11} / C_{12}$	412,0	367,08	899,38	999,90	1100,00	1200,09	1300,16
$C_{11} / C_{12} / C_{13}$	407,0	442,18	898,53	999,49	1099,80	1200,00	1300,12
$C_{12} / C_{13} / C_{14}$	393,8	517,0	896,47	998,43	1099,28	1199,75	1300,00

*) Peterson und Hirsch

Säule : 155 m, i.D. 0,27 mm

Stationäre Phase : Dimethylpolycarboransiloxan Dexsil 300

$n_{theoretisch}$: 307 500 bei $k' = 21,37$

Trennzahl : 78 für C_{13} / C_{14}

Temperatur : 80 °C

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

Abbildung 50:

Logarithmus der Nettoretentionszeiten log t_s in Abhängigkeit von der C-Zahl von n-Alkanen bei verschieden bestimmten Totzeiten t_m und konstanter Säulentemperatur

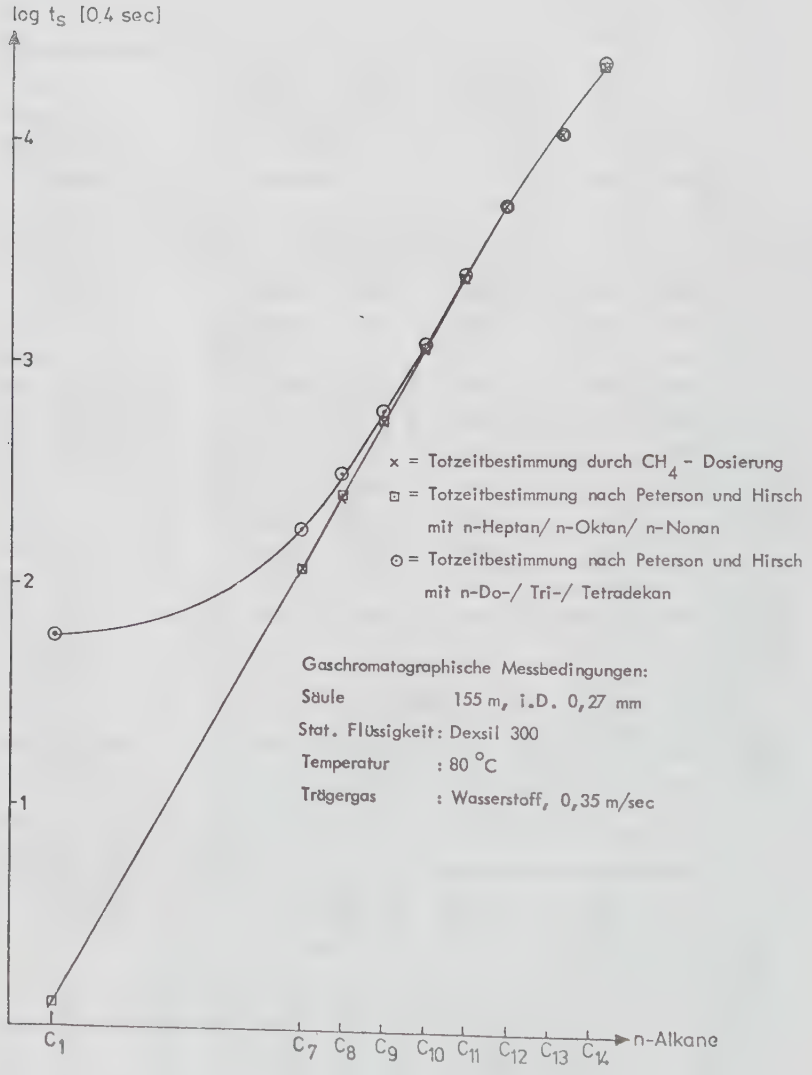


Tabelle 48b: Logarithmen der Nettoretentionszeiten t_s in Abhängigkeit von der C-Zahl von n-Alkanen für verschiedene bestimmmte Totzeiten t_m

n-Alkan	Totzeitbestimmung durch Methandosierung		Totzeitbestimmung nach Peterson und Hirsch mit den n - Alkanen			
			C - 7 / C - 8 / C - 9		C - 12 / C - 13 / C - 14	
	t_s [0,4 sec]	log t_s	t_s [0,4 sec]	log t_s	t_s [0,4 sec]	log t_s
C - 7	117,4	2,06967	118,7	2,07445	174,5	2,24180
C - 8	250,9	2,39950	252,2	2,40175	308,0	2,48855
C - 9	534,5	2,72795	535,8	2,72900	591,6	2,77203
C - 10	1134,8	3,05492	1136,1	3,055542	1191,9	3,07624
C - 11	2398,4	3,37992	2399,7	3,38016	2455,5	3,39014
C - 12	5054,7	3,70370	5056,0	3,70381	5111,8	3,70857
C - 13	10623,7	4,02628	10625,0	4,02633	10680,8	4,02860
C - 14	22259,8	4,34752	22261,1	4,34755	22316,9	4,34863
z = C-Zahl der n-Alkane	$\log t_s = -0{,}73238\ 10^{-3} z^2 + 0{,}34075\ z - 0{,}2796$		$\log t_s = -0{,}56101\ 10^{-3} z^2 + 0{,}33659\ z - 0{,}25457$		$\log t_s = -0{,}11362\ 10^{-2} z^3 + 0{,}41006\ 10^{-1} z^2 - 0{,}17041\ z + 1{,}813$	
	$P_{Irr}{}^{*} \leq 0{,}04\ \%$		$P_{Irr}{}^{*} \leq 0{,}5\ \%$		$P_{Irr}{}^{*} \leq 5\ \%$	
	Mult. Korrel.koeff.: 1,000 000		Mult. Korrel.koeff.: 0,999 999		Mult. Korrel. Koeff.: 0,999 994	

*) Irrtumswahrscheinlichkeit, daß eine Gleichung niedrigeren Grades besser zutrifft

Gaschromatographische Messbedingungen siehe Tabelle 52a:

Tabelle 49 a: Indexbestimmung nach Kovats [30] durch Interpolation zwischen Homologen für verschieden bestimmte Totzeiten t_m

Totzeitbestimmung	t_m [sec]	Interpolation zwischen n-Alkanen mit z und (z + 2) C-Atomen Index des interpolierten n-Alkans mit (z + 1) C-Atomen							Interpolation zwischen n-Alkanen mit z und (z + 4) C-Atomen Index des interpolierten n-Alkans mit (z + 2) C-Atomen		
		$k' \leq 1$		$k' \simeq 1$	$k' \geq 1$						
		C - 19	C - 20	C - 21	C - 22	C - 23	C - 24	C - 25	C - 28	C - 30	C - 32
Lösungsmittel* (Toluol)	160,0	1899,14	1999,35	2099,65	2199,71	2300,01	2400,01	2500,01	2800,83	3000,88	3200,95
P + H **											
$C_{18}/C_{19}/C_{20}$	165,1	1900,00	1999,99	2100,13	2200,07	2300,28	2400,21	2500,16	2801,08	3001,02	3201,02
$C_{19}/C_{20}/C_{21}$	165,2	1900,01	2000,00	2100,14	2200,08	2300,29	2400,21	2500,16	2801,09	3001,02	3201,03
$C_{20}/C_{21}/C_{22}$	163,7	1899,76	1999,81	2100,00	2199,97	2300,21	2400,15	2500,12	2801,02	3000,98	3201,00
$C_{21}/C_{22}/C_{23}$	164,1	1899,82	1999,86	2100,03	2200,00	2300,23	2400,17	2500,13	2801,03	3000,98	3201,01
$C_{22}/C_{23}/C_{24}$	159,7	1899,10	1999,31	2099,62	2199,69	2300,00	2400,00	2500,00	2800,82	3000,87	3200,94
$C_{23}/C_{24}/C_{25}$	159,8	1899,12	1999,33	2099,63	2199,70	2300,01	2400,00	2500,00	2800,83	3000,88	3200,94
$C_{24}/C_{25}/C_{26}$	159,7	1899,15	1999,36	2099,66	2199,72	2300,02	2400,01	2500,01	2800,84	3000,88	3200,95
$C_{26}/C_{28}/C_{30}$	142,7	1896,84	1997,52	2098,22	2198,61	2299,17	2399,37	2499,53	2800,00	3000,42	3200,69
$C_{28}/C_{30}/C_{32}$	126,8	1895,36	1996,25	2097,17	2197,76	2298,50	2398,85	2499,12	2799,28	3000,01	3200,46
$C_{30}/C_{32}/C_{34}$	96,4	1893,30	1994,37	2095,52	2196,36	2297,35	2397,91	2498,39	2797,91	2999,22	3200,01

* Peakanfang von Toluol; unter den Messbedingungen kein Unterschied zur Retentionszeit von Methan

** Peterson und Hirsch

Säule : 29 m, i.D. 0,27 mm; Alkaliglas HCl-/H_2O-/HF-behandelt
Stat. Phase : Methyl-Phenylpolycaboransiloxan Dexsil 400
Temperatur : 250 °C
Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec.

Tabelle 49 b: Logarithmen der Nettoretentionszeiten t_s in Abhängigkeit von der C-Zahl von n-Alkanen für verschieden bestimmte Totzeiten t_m

n-Alkan	t_m =Lösungsmittelanfang* (Toluol)		t_m -Bestimmung nach Peterson u. Hirsch mit C_{18} / C_{19} / C_{20}		C_{30} / C_{32} / C_{34}	
	t_s [0,4 sec]	log t_s	t_s [0,4 sec]	log t_s	t_s [0,4 sec]	log t_s
C-18	168,8	2,22737	156,1	2,19340	327,9	2,51574
C-19	223,4	2,34908	210,7	2,32366	382,5	2,58263
C-20	297,1	2,47290	284,4	2,45393	456,2	2,65916
C-21	396,6	2,59835	383,9	2,58422	555,7	2,74484
C-22	530,5	2,72469	517,8	2,71416	689,6	2,83860
C-23	710,8	2,85175	698,1	2,84392	869,9	2,93947
C-24	952,3	2,97877	939,6	2,97294	1111,4	3,04587
C-25	1275,8	3,10578	1263,1	3,10144	1434,9	3,27142
C-26	1709,1	3,23277	1696,4	3,22953	1868,2	3,27142
C-28	3062,8	3,48612	3050,1	3,48431	3221,9	3,50811
C-30	5462,2	3,73737	5449,5	3,73636	5621,3	3,74984
C-32	9691,9	3,98641	9679,2	3,98584	9851,0	3,99348
C-34	17104,2	4,23310	17091,5	4,23278	17263,3	4,23712
z = Zahl der C-Atome	$\log t_s = -0,2592 \cdot 10^{-4} z^3 + 0,1976 \cdot 10^{-2} z^2 + 0,7688 \cdot 10^{-1} z + 0,353$		$\log t_s = -0,6512 \cdot 10^{-5} z^3 + 0,2475 \cdot 10^{-3} z^2 + 0,1282 \cdot 10^{-3} z + 0,157$		$\log t_s = +0,4166 \cdot 10^{-5} z^4 - 0,5646 \cdot 10^{-3} z^3 + 0,2853 \cdot 10^{-2} z + 0,515$	
	P_{Irr} ** ≤ 2,1 %		P_{Irr} ≤ 2,5 %		P_{Irr} ≤ 2,1 %	
	Mult. Korrel. Koeff		Mult. Korrel. Koeff		Mult. Korrel. Koeff.	

* unter den Messbedingungen kein Unterschied zur Retentionszeit von Methan

** Irrtumswahrscheinlichkeit, daß eine Gleichung niedrigeren Grades besser zutrifft

GC-Bedingungen siehe Tabelle 49 a

Abbildung 51: Logarithmisches Elutionsverhalten von schwerflüchtigen n-Alkanen

a: Isothermes Glaskapillar - Gaschromatogramm

Säule : 29 m, i.D. 0,27 mm, Alkaliglas, HCl-/H_2O-/HF - behandelt

Stat. Phase : Methyl-/Phenylpolycarboransiloxan Dexsil 400

Filmdicke : 170 nm

Temperatur : 320 °C

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

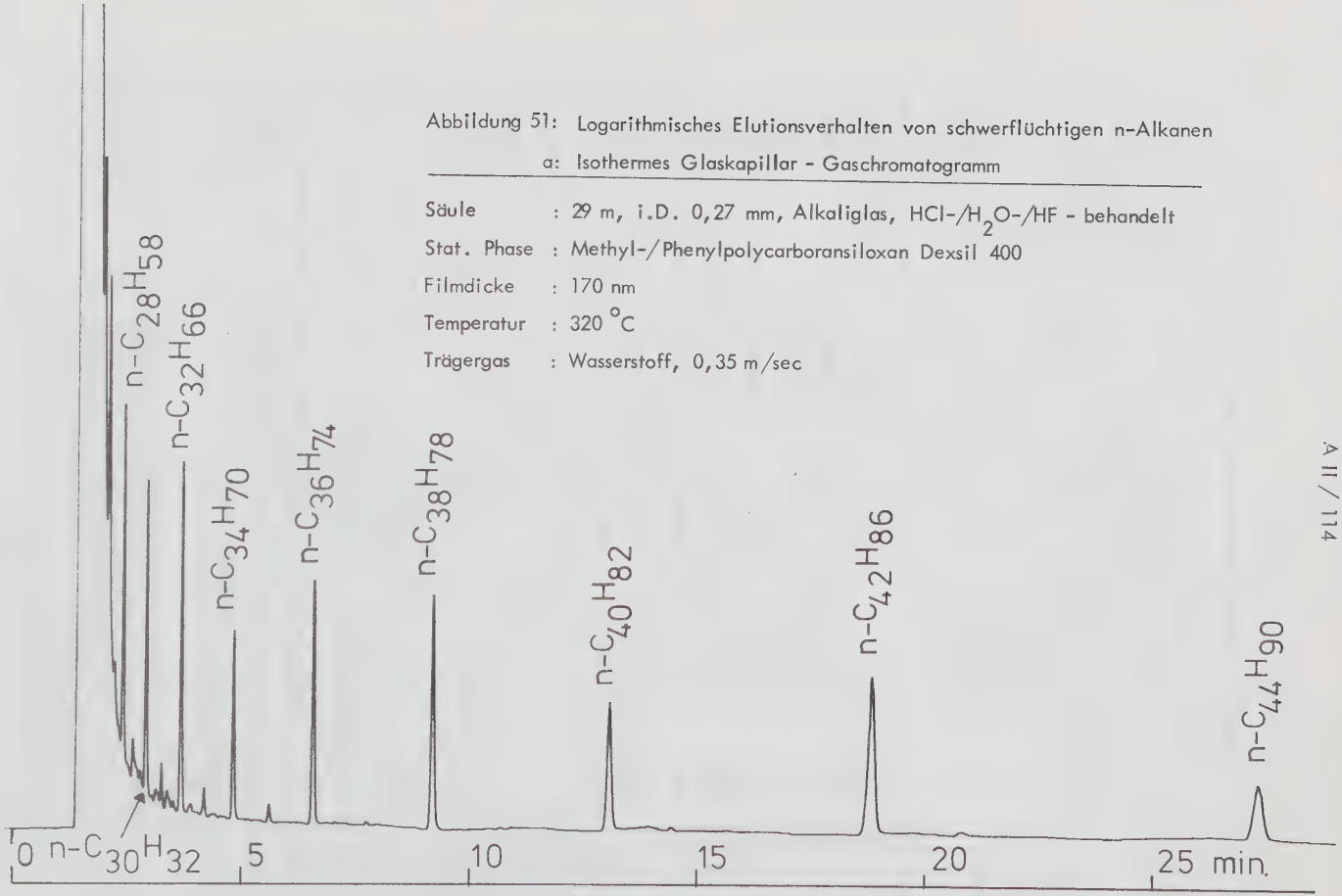


Abbildung 51 : Logarithmisches Elutionsverhalten von schwerflüchtigen n-Alkanen bei konstanter Säulentemperatur

b: Logarithmus der Nettoretentionszeiten log t_s in Abhängigkeit von der C-Zahl der n-Alkane bei verschieden bestimmten Totzeiten t_m

Doppelbestimmung der Retentionsdaten

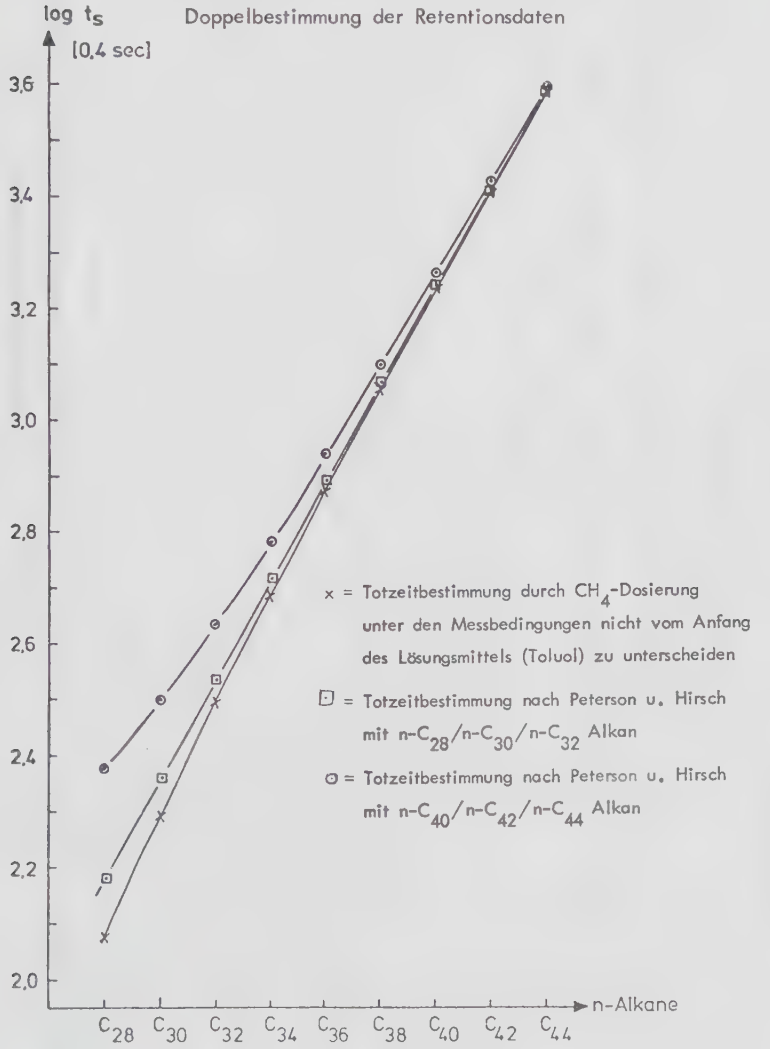


Tabelle 50a: Indexbestimmung nach Kovats [30] durch Interpolation zwischen Homologen für verschieden bestimmte Totzeiten t_m

Totzeitbestimmung	t_m [sec]	Interpolation zwischen n-Alkanen mit z und (z + 4) C-Atomen Index des interpolierten n-Alkans mit (z + 2) C-Atomen						
		k' ≤ 1	k' ≥ 1					
		C - 30	C - 32	C - 34	C - 36	C - 38	C - 40	C - 42
Lösungsmittel* (Toluol)	94,4	3007,10	3204,62	3403,00	3602,50	3801,97	4000,98	4201,83
P + H **								
$C_{28}/C_{30}/C_{32}$	81,2	3000,01	3200,19	3400,16	3600,67	3800,77	4000,19	4201,31
$C_{30}/C_{32}/C_{34}$	80,6	2999,73	3200,00	3400,04	3600,58	3800,72	4000,16	4201,28
$C_{32}/C_{34}/C_{36}$	80,4	2999,64	3199,94	3400,00	3600,56	3800,70	4000,15	4201,28
$C_{34}/C_{36}/C_{38}$	76,1	2997,80	3198,70	3399,16	3600,00	3800,33	3999,90	4201,11
$C_{36}/C_{38}/C_{40}$	74,0	2996,29	3197,64	3398,44	3599,51	3800,00	3999,68	4200,96
$C_{38}/C_{40}/C_{42}$	77,8	2998,55	3199,21	3399,51	3600,23	3800,48	4000,00	4201,18
$C_{40}/C_{42}/C_{44}$	46,1	2988,65	3191,86	3394,22	3596,52	3797,93	3998,26	4200,00

* Peakanfang von Toluol; kein Unterschied zur Retentionszeit von Methan unter den gewählten Messbedingungen

** Peterson u. Hirsch

Säule : 29 m, i.D. 0,27 mm, Alkaliglas, HCl-/H_2O-/HF-behandelt

Stat. Phase: Dexsil 400 (Methylphenylpolysiloxan)

Temperatur: 320 C Trägergas: Wasserstoff: 0,35 m/sec

Tabelle 50b: Logarithmen der Nettoretentionszeiten t_s in Abhängigkeit von der C-Zahl von n-Alkanen für verschieden bestimmte Totzeiten t_m

	t_m = Lösungsmittel-anfang (Toluol)*		t_m-Bestimmung nach Peterson u. Hirsch mit C-28/C-30/C-32		C-40/C-42/C-44	
n-Alkane	t_s [0,4sec]	log t_s	t_s [0,4sec]	log t_s	t_s [0,4sec]	log t_s
C-28	119,0	2,0754	152,0	2,18184	239,7	2,37958
C-30	196,0	2,29230	229,1	2,35993	316,7	2,50065
C-32	312,1	2,49249	345,2	2,53801	432,8	2,63629
C-34	486,7	2,68722	519,7	2,71573	607,4	2,78344
C-36	749,0	2,87445	782,0	2,89321	869,7	2,93934
C-38	1140,5	3,05708	1173,5	3,06948	1261,2	3,10078
C-40	3444,9	3,23615	1755,5	3,24440	1843,2	3,26556
C-42	3591,1	3,41348	2624,1	3,41898	2711,8	3,43325
C-44	3869,0	3,58760	3902,1	3,59129	3989,7	3,60094
z = Zahl der C-Atome	$\log t_s = -0,6716 \cdot 10^{-3} z^2$ $+0,1422 \cdot z$ $-1,375$		$\log t_s = -0,1007 \cdot 10^{-3} z^2$ $+0,9543 \cdot 10^{-1} z$ $-0,412$		$\log t_s = -0,4900 \cdot 10^{-4} z^3$ $+0,6093 \cdot 10^{-3} z^2$ $+0,1687 \cdot z + 3,401$	
	$P_{Irr}^{**} \leq 3,6$ %		$P_{Irr} \leq 2,9$ %		$P_{Irr} \leq 0,3$ %	
	Mult. Korrel. Koeef. 0,999 97		Mult. Korrel. Koeff. 0,999 99		Mult. Korrel. Koeff. 0,999 999	

* unter den GC-Bedingungen kein signifikanter Unterschied zur Retentionszeit von Methan

** Irrtumswahrscheinlichkeit, daß eine Gleichung niedrigeren Grades besser zutrifft

GC-Bedingungen siehe Tabelle 50 a

Abbildung 52 a:

Ruthenium-Hartparaffin aus einer Fischer-Tropsch-Synthese

Säule : 30 m, i.D. 0,32 mm; Borsilikatglas Duran 50

Stat. Phase : Methyl-/Phenylpolycarboransiloxan Dexsil 400

Filmdicke : ca. 30 nm

Temperatur : 180 - 350 °C ; 2 °C / min

Trägergas : Wasserstoff; 0,50 m / sec bei 180 °C

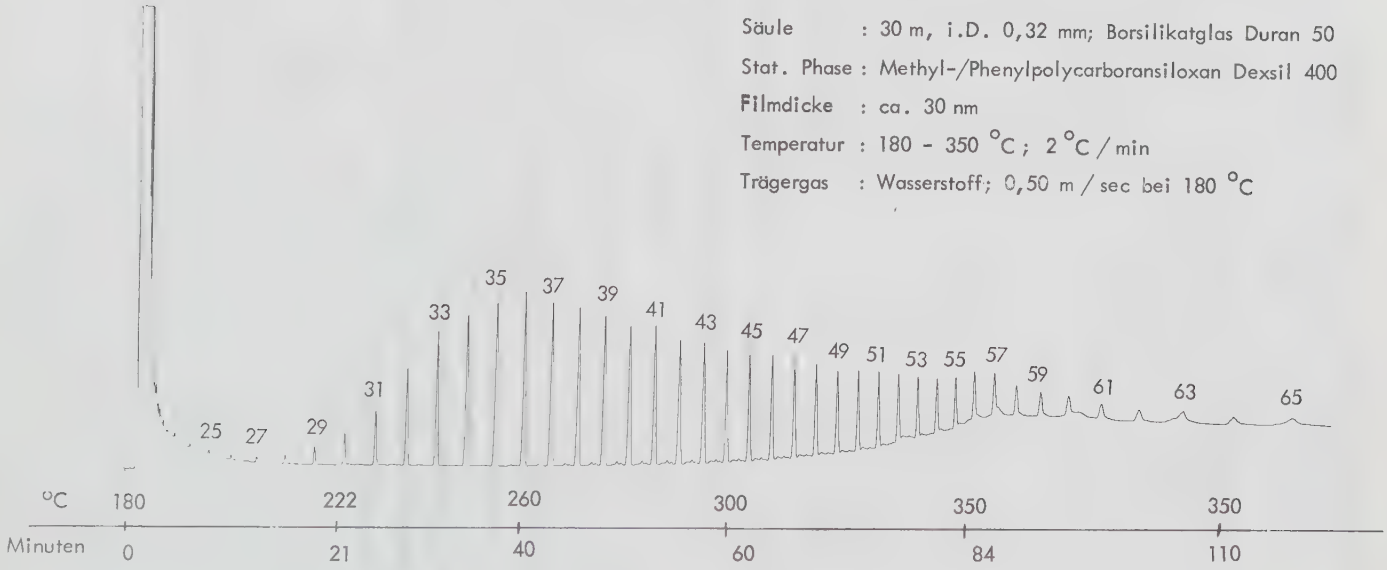


Abbildung 52 b: Massenspektrum eines Ruthenium-Hartparaffins

Messbedingungen: Elektronenstoßionisation: 70 eV
Emission : 300 uA
Quellentemperatur : 250 °C
Verdampfungstemperatur: 390 °C

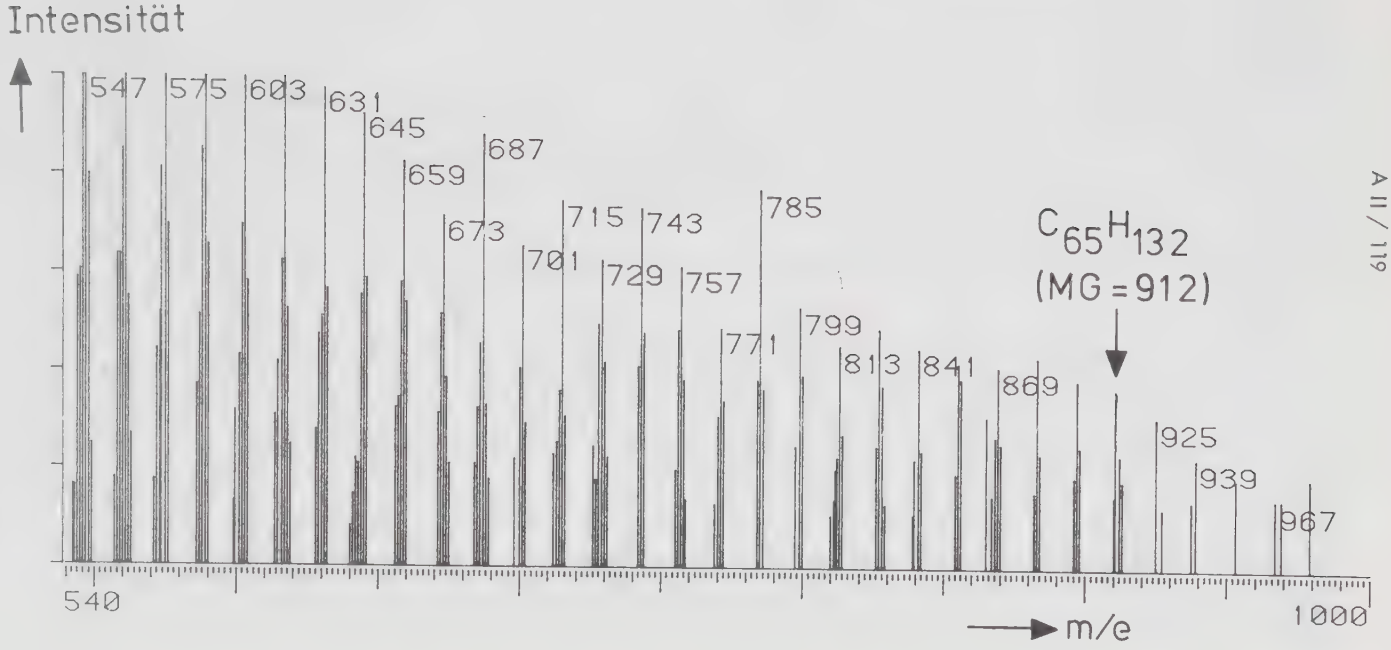


Abbildung 52c: Retentionszeiten von n-Alkanen in Abhängigkeit von ihren C-Zahlen im linearen Temperaturprogramm von 180 - 350 °C (2 °C/min)

weitere GC-Bedingungen siehe Abbildung 52a

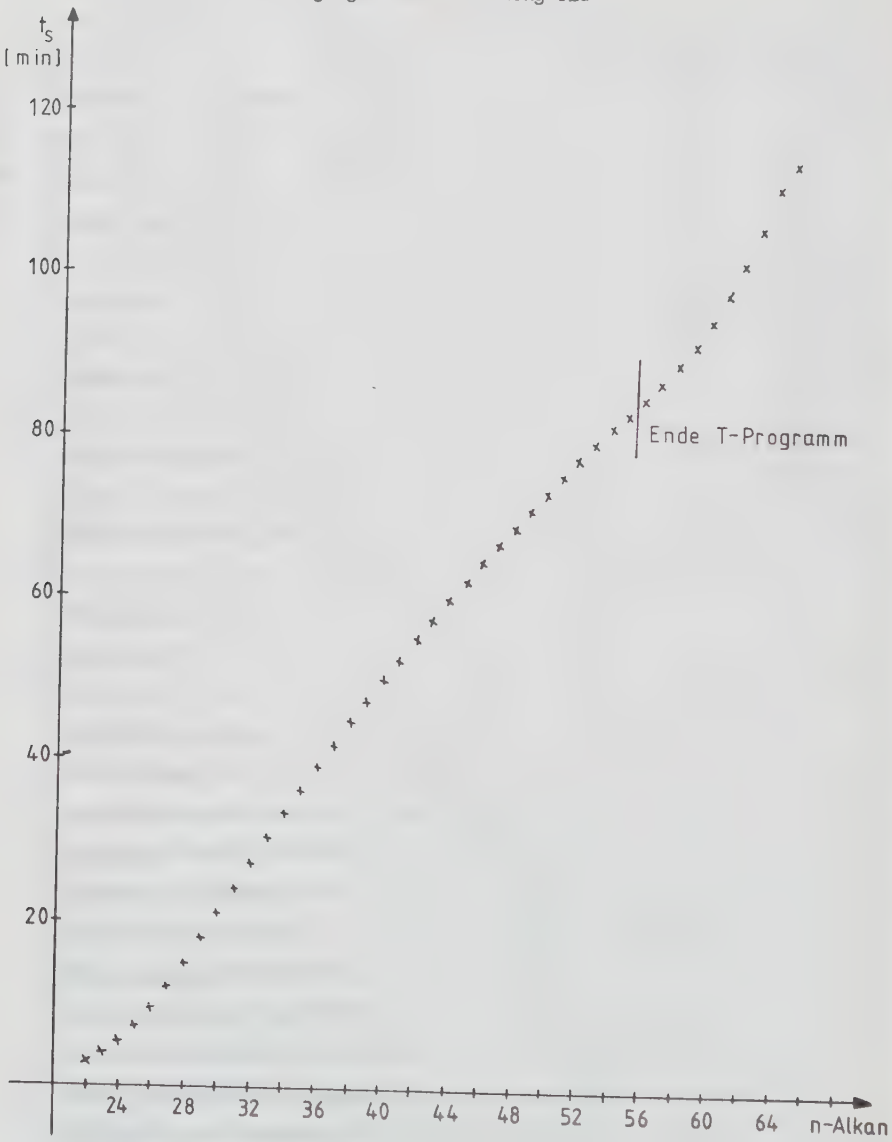


Tabelle 51: Nettoretentionszeiten t_s von n-Alkanen als Bestandteile eines Fischer-Tropsch - Rutheniumhartparaffins in Abhängigkeit von den C-Zahlen der Homologen bei linear temperaturprogrammierter Arbeitsweise

n - Alkane	t_s [min.]	n - Alkane	t_s [min.]
22	2,8	39	47,3
23	3,9	40	49,9
24	5,4	41	52,4
25	7,3	42	55,0
26	9,6	43	57,4
27	12,2	44	59,8
28	15,0	45	62,1
29	18,0	46	64,4
30	21,1	47	66,7
31	24,1	48	68,9
32	27,3	49	71,0
33	30,4	50	73,1
34	33,4	51	75,2
35	36,3	52	77,2
36	39,2	53	79,2
37	41,9	54	81,1
38	44,7	55	83,0

Säule : 29 m Borsilikatglas, i.D. 0,32 mm

Stat. Flüssigkeit : Methyl-Phenylpolysiloxan Dexsil 400

Temperatur : 180 - 380 °C, 2 °C/min.

Trägergas : Wasserstoff, 0,50 m/sec. bei 180 °C

Abbildung 53:

Gesamtretentionszeiten t_{m+s} von n-Alkanen in Abhängigkeit von den C-Zahlen der Homologen bei linear temperaturprogrammierter Arbeitsweise

Säule : 45 m, i.D. 0,27 mm
Stat. Flüssigkeit : Dimethylpolysiloxan OV 101
Temperatur : 105 - 280 °C
Trägergas : Stickstoff, 0,21 m/sec. bei 105 °C

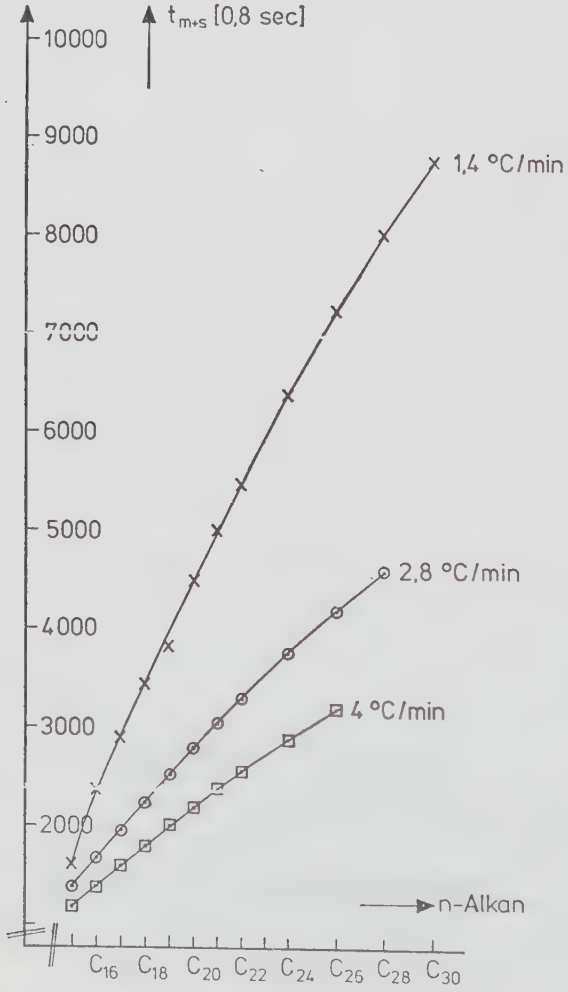


Tabelle 52 a: Bestimmung von linearen Indices von n-Alkanen im Temperaturprogramm durch lineare Interpolation zwischen dem nächst höheren und niedrigeren Homologen bei verschiedenen Aufheizraten

	1,4 °C/min		2,8 °C/min		4 °C/min	
n - Alkan	interpolierter Indexwert	Abweichung vom Sollwert	interpolierter Indexwert	Abweichung vom Sollwert	interpolierter Indexwert	Abweichung vom Sollwert
C - 16	1598,0	- 2,0	1599,9	- 0,1	1600,5	+ 0,5
C - 17	1699,9	- 0,1	1701,0	+ 1.0	1701,5	+ 1,5
C - 18	1798,2	- 1,8	1799,1	- 0,1	1798,7	- 1,3
C - 19	1905,2	+ 5,2	1905,4	+ 5,4	1906,4	+ 6,4
C - 20	1997,5	- 2,5	1997,9	- 2,1	1996,9	- 3,1
C - 21	2106,7	+ 6,7	2106,5	+ 6,5	2107,9	+ 7,9
C - 22*	2200,5	+ 0,5	2200,8*	+ 0,8	2200,0*	0
C - 24	2407,2	+ 7,2	2407,5	+ 7,5	2407,5	+ 7,5
C - 26	2607,4	+ 7,4	2607,1	+ 7,1		
C - 28	2806,8	+ 6,8				

* ab n-$C_{22}H_{44}$ Interpolation nur noch zwischen geradzahligen Homologen

Säule : 45m, i.D. 0,27 mm

Stat. Flüssigkeit : Dimethylpolysiloxan OV 101

Temperatur : 105 - 280 °C

Trägergas : Stickstoff, 0,21 m/sec. bei 105 °C

Tabelle 52 b:

Gesamtretentionszeiten t_{m+s} von n-Alkanen in Abhängigkeit von den C-Zahlen der Homologen bei linear temperaturprogrammierter Arbeitsweis mit verschiedenen Aufheizraten

	1,4 °C/min.	2,8 °C/min.	4,0 °C/min.
n - Alkane	t_{m+s} [0,8 sec.]	t_{m+s} [0.8 sec.]	t_{m+s} [0.8 sec.]
C-15	1848,5	1368,2	1164,1
C-16	2360,4	1655,3	1374,5
C-17	2893,5	1943,2	1582,6
C-18	3428,1	2225,6	1784,7
C-19	3981,3	2513,2	1992,0
C-20	4480,2	2771,4	2174,2
C-21	5004,6	3040,5	2368,2
C-22	5463,1	3276,6	2533,8
C-24	6373,0	3742,9	2864,8
C-26	7219,8	4175,4	3171,9
C-28	8006,5	4578,3	
C-30	8741,6		
z = C-Zahl der n-Alkane	$t_{m+s} = -\ 7{,}317\ z^2 + 791{,}8\ z - 8423{,}4$	$t_{m+s} = -\ 4{,}398\ z^2 + 436{,}6\ z - 4200{,}7$	$t_{m+s} = -\ 0{,}5955\ z^3 + 33{,}54\ z^2 - 427{,}8\ z + 2071{,}5$
	$P_{Irr} \leq 1{,}6\ \%$	$P_{Irr} \leq 0{,}06\ \%$	$P_{Irr} \leq 3{,}7\ \%$
	Mult. Korrel. Koeff. 0.99 996	Mult. Korrel. Koeff. 0.99 998	Mult. Korrel. Koeff. 0.9 996

GC-Bedingungen siehe Tabelle 52 a

Abbildung 54:

Elutionsverhalten von homologen Fettsäuremethylestern im Temperaturprogramm

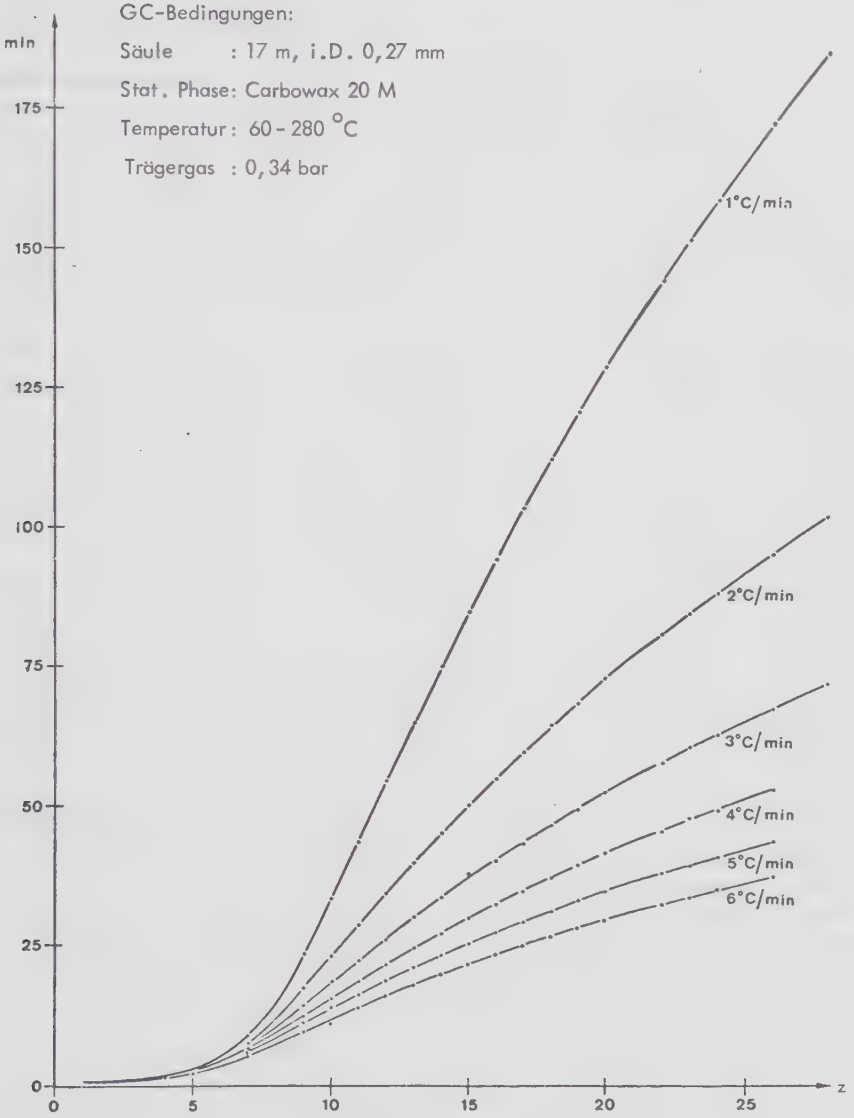
GC-Bedingungen:

Säule : 17 m, i.D. 0,27 mm

Stat. Phase: Carbowax 20 M

Temperatur: 60 - 280 °C

Trägergas : 0,34 bar



z = C-Zahlen der Säurereste der Fettsäuremethylester

Tabelle 53a:

Bestimmung von linearen Indices von Fettsäuremethylestern im Temperaturprogramm durch lineare Interpolation zwischen den Homologen

Fettsäuremethylester	1 °C/min.		2 °C/min.		3 °C/min.	
	interpolierter Indexwert	Abweichung vom Sollwert	interpolierter Indexwert	Abweichung vom Sollwert	interpolierter Indexwert	Abweichung vom Sollwert
$H_{11}C_5OOCH_3$ [a]	449,0	- 51,0	446,3	- 53,7	449,7	- 50,3
$H_{15}C_7OOCH_3$ [b]	619,9	- 80,1	639,6	- 60,4	658,4	- 41,6
$H_{19}C_9OOCH_3$ [c]	878,1	- 21,9	889,0	- 11,0	892,1	- 7,9
$H_{21}C_{10}OOCH_3$ [d]	997,8	- 2,2	1000,5	+ 0,5	1001,4	+ 1,4
$H_{23}C_{11}OOCH_3$ [d]	1098,2	- 1,8	1099,95	- 0,05	1100,8	+ 0,8
$H_{25}C_{12}OOCH_3$ [d]	1200,7	+ 0,7	1201,5	+ 1,5	1201,6	+ 1,6
$H_{27}C_{13}OOCH_3$ [d]	1301,6	+ 1,6	1302,0	+ 2,0	1302,0	+ 2,0
$H_{29}C_{14}OOCH_3$ [d]	1402,6	+ 2,6	1402,2	+ 2,2	1402,7	+ 2,7
$H_{31}C_{15}OOCH_3$ [d]	1500,8	+ 0,8	1501,8	+ 1,8	1501,4	+ 1,4
$H_{33}C_{16}OOCH_3$ [d]	1601,6	+ 1,6	1601,5	+ 1,5	1601,8	+ 1,8
$H_{35}C_{17}OOCH_3$ [d]	1703,3	+ 3,3	1702,5	+ 2,5	1702,7	+ 2,7
$H_{37}C_{18}OOCH_3$ [d]	1801,1	+ 1,1	1801,7	+ 1,7	1801,2	+ 1,2
$H_{39}C_{19}OOCH_3$ [d]	1901,4	+ 1,4	1901,4	+ 1,4	1901,9	+ 1,9
$H_{41}C_{20}OOCH_3$ [a]	2004,1	+ 4,1	2004,1	+ 4,1	2003,7	+ 3,7
$H_{45}C_{22}OOCH_3$ [b]	2206,3	+ 2,3	2206,2	+ 6,2	2207,1	+ 7,1
$H_{49}C_{24}OOCH_3$ [b]	2406,7	+ 6,7	2406,3	+ 6,3	2405,9	+ 5,9
$H_{53}C_{26}OOCH_3$ [b]	2606,1	+ 6,1	2600,7	+ 0,7	2606,5	+ 6,5

a) interpolierter Fettsäuremethylester: (z + 1) C-Atome
interpoliert zwischen Fettsäuremethylestern mit z und (z + 3) C-Atomen

b) interpolierter Fettsäuremethylester: (z + 2) C-Atome
interpoliert zwischen Fettsäuremethylestern mit z und (z + 4) C-Atomen

c) interpolierter Fettsäuremethylester (z + 2) C-Atome
interpoliert zwischen Fettsäuremethylestern mit z und (z + 3) C-Atomen

d) interpolierter Fettsäuremethylester: (z + 1) C-Atome
interpoliert zwischen Fettsäuremethylestern mit z und (z + 2) C-Atomen

Gaschromatographische Messbedingungen:

Säule : 17 m, i.D. 0,27 mm

Stationäre Flüssigkeit : Carbowax 20 M (Polyäthylenglykol)

Temperaturen : 60 - 280 °C, Aufheizrate jeweils angegeben

Trägergas : Wasserstoff, 0,34 bar

Tabelle 53a, Fortsetzung:

Bestimmung von linearen Indices von Fettsäuremethylestern im Temperaturprogramm durch lineare Interpolation zwischen den Homologen

Fettsäuremethylester	4 °C/min.		5 °C/min.		6 °C/min.	
	interpolierter Indexwert	Abweichung vom Sollwert	interpolierter Indexwert	Abweichung vom Sollwert	interpolierter Indexwert	Abweichung vom Sollwert
$H_{11}C_5OOCH_3$ [a]	456,9	- 43,1	447,6	- 52,4	455,8	- 44,2
$H_{15}C_7OOCH_3$ [b]	664,8	- 35,2	678,0	- 22,0	666,7	- 33,3
$H_{19}C_9OOCH_3$ [c]	894,4	- 5,6	898,9	- 1,1	899,5	- 0,5
$H_{21}C_{10}OOCH_3$ [d]	1002,8	+ 2,8	1003,0	+ 3,0	1003,0	+ 3,0
$H_{23}C_{11}OOCH_3$ [d]	1100,2	+ 0,2	1100,6	+ 0,6	1101,2	+ 1,2
$H_{25}C_{12}OOCH_3$ [d]	1202,3	+ 2,3	1202,5	+ 2,5	1202,8	+ 2,8
$H_{27}C_{13}OOCH_3$ [d]	1302,2	+ 2,2	1302,0	+ 2,0	1302,2	+ 2,2
$H_{29}C_{14}OOCH_3$ [d]	1402,8	+ 2,8	1403,0	+ 3,0	1402,7	+ 2,7
$H_{31}C_{15}OOCH_3$ [d]	1501,2	+ 1,2	1501,3	+ 1,3	1501,6	+ 1,6
$H_{33}C_{16}OOCH_3$ [d]	1601,9	+ 1,9	1601,7	+ 1,7	1601,8	+ 1,8
$H_{35}C_{17}OOCH_3$ [d]	1702,4	+ 2,4	1702,8	+ 1,8	1702,4	+ 2,4
$H_{37}C_{18}OOCH_3$ [d]	1801,7	+ 1,7	1801,4	+ 1,4	1801,6	+ 1,6
$H_{39}C_{19}OOCH_3$ [d]	1902,1	+ 2,1	1902,1	+ 2,1	1901,6	+ 1,6
$H_{41}C_{20}OOCH_3$ [a]	2005,7	+ 5,7	2006,7	+ 6,7	2004,0	+ 4,0
$H_{45}C_{22}OOCH_3$ [b]	2205,0	+ 5,0	2205,0	+ 5,0	2206,7	+ 6,7
$H_{49}C_{24}OOCH_3$ [b]	2406,2	+ 6,2	2405,3	+ 5,3	2404,1	+ 4,1

a) interpolierter Fettsäuremethylester: (z + 1) C-Atome
interpoliert zwischen Fettsäuremethylestern mit z und (z + 3) C-Atomen

b) interpolierter Fettsäuremethylester: (z + 2) C-Atome
interpoliert zwischen Fettsäuremethylestern mit z und (z + 4) C-Atomen

c) interpolierter Fettsäuremethylester: (z + 2) C-Atome
interpoliert zwischen Fettsäuremethylestern mit z und (z + 3) C-Atomen

d) interpolierter Fettsäuremethylester: (z + 1) C-Atome
interpoliert zwischen Fettsäuremethylestern mit z und (z + 2) C-Atomen

Gaschromatographische Messbedingungen:

Säule : 17 m, i.D. 0,27 mm

Stationäre Flüssigkeit : Carbowax 20 M (Polyäthylenglykol)

Temperaturen : 60 - 280 °C, Aufheizrate jeweils angegeben

Trägergas : Wasserstoff, 0,34 bar

Tabelle 53b:

Gesamtretentionszeiten t_{m+s} von Fettsäuremthylestern in Abhängigkeit von den C - Zahlen z der jeweiligen Carbonsäurereste bei linear temperaturprogrammierter Arbeitsweise mit verschiedenen Aufheizraten.

	1 °C/min	2 °C/min	3°C/min.	4°C/min.	5 °C/min.	6°C/min.
Fettsäuremethylester	t_{m+s} [0,2 sec]	t_{m+s} [0,2 sec]	t_{m+s} [0,2 sec]	t_{m+s} [0,2 sec]	t_{m+s} [0,2 sec]	t_{m+s} [0,2 sec]
$H_9\ C_4\ OOCH_3$	479,4	403,6	403,4	426,2	335,1	359,4
$H_{11}\ C_5\ OOCH_3$	841,0	689,2	685,5	714,7	568,2	578,6
$H_{15}\ C_7\ OOCH_3$	2695,5	2255,8	2104,7	1946,1	1803,0	1538,1
$H_{19}\ C_9\ OOCH_3$	7027,1	5177,1	4269,5	3703,5	3343,5	2880,3
$H_{21}\ C_{10}\ OOCH_3$	9990,6	6892,5	5486,0	4658,8	4126,2	3556,3
$H_{23}\ C_{11}\ OOCH_3$	13084,5	8590,9	6669,7	5561,3	4863,5	4192,3
$H_{25}\ C_{12}\ OOCH_3$	16292,1	10290,9	7834,8	6460,5	5591,7	4812,7
$H_{27}\ C_{13}\ OOCH_3$	19455,8	11941,9	8962,1	7318,5	6284,7	5399,0
$H_{29}\ C_{14}\ OOCH_3$	22518,8	13528,1	10045,1	8140,0	6951,1	5959,9
$H_{31}\ C_{15}\ OOCH_3$	25427,0	15046,5	11070,5	8917,3	7579,1	6490,8
$H_{33}\ C_{16}\ OOCH_3$	28290,1	16510,3	12067,7	9676,9	8191,3	7004,7
$H_{35}\ C_{17}\ OOCH_3$	31064,9	17930,4	13029,9	10407,5	8783,4	7500,4
$H_{37}\ C_{18}\ OOCH_3$	33662,5	19280,8	13942,1	11103,4	9343,6	7972,6
$H_{39}\ C_{19}\ OOCH_3$	36204,9	20587,0	14832,9	11776,0	9888,7	8430,3
$H_{41}\ C_{20}\ OOCH_3$	38679,5	21856,7	15691,2	12420,8	10411,7	8873,2
$H_{45}\ C_{22}\ OOCH_3$	43335,9	24244,8	17317,0	12606,1	11359,5	9707,3
$H_{49}\ C_{24}\ OOCH_3$	47708,3	26488,4	18831,5	14733,5	12261,0	10487,3
$H_{53}\ C_{26}\ OOCH_3$	51799,1	28594,0	20259,1	15792,9	13115,9	11235,8
$H_{57}\ C_{28}\ OOCH_3$	55646,5	30684,7	21597,4			
z = C-Zahl der Säurereste	$t_{m+s} = f(z^4)$ $P^*_{Irr} \leq 1\ \%$	$t_{m+s} = f(z^5)$ $P_{Irr} \leq 1,3\%$	$t_{m+s} = f(z^5)$ $P_{Irr} \leq 0,5\%$	$t_{m+s} = f(z^5)$ $P_{Irr} \leq 1,8\%$	$t_{m+s} = f(z^6)$ $P_{Irr} \leq 1,2\%$	$t_{m+s} = f(z^6)$ $P_{Irr} \leq 1,8\%$

* Irrtumswahrscheinlichkeit, daß Gleichung niedrigeren Gerades besser zutrifft

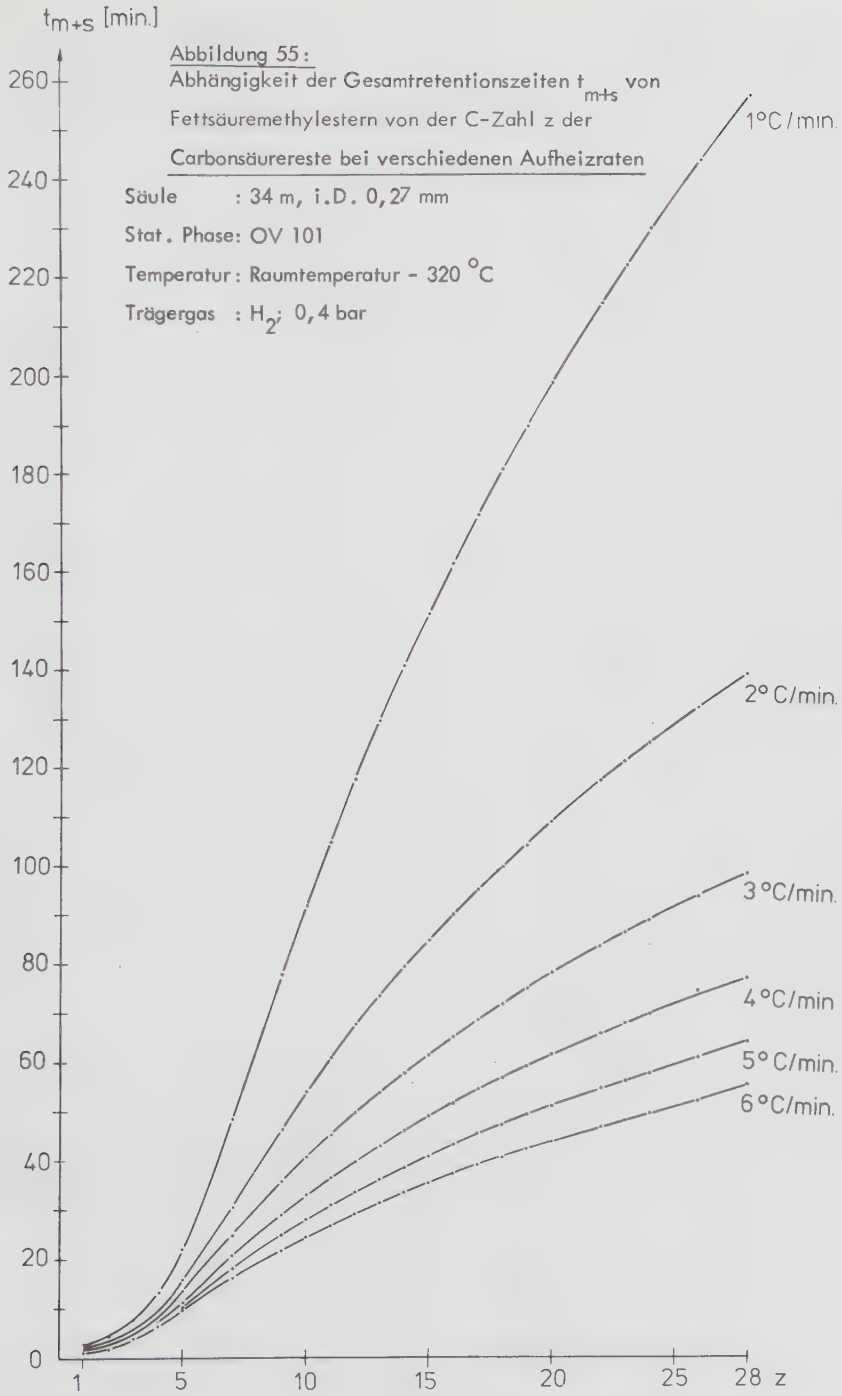


Abbildung 55:
Abhängigkeit der Gesamtretentionszeiten t_{m+s} von Fettsäuremethylestern von der C-Zahl z der Carbonsäurereste bei verschiedenen Aufheizraten

Säule : 34 m, i.D. 0,27 mm
Stat. Phase: OV 101
Temperatur: Raumtemperatur - 320 °C
Trägergas : H_2; 0,4 bar

Abbildung 56: Elutionsverhalten von p-Polyphenylen im linearen Temperaturprogramm mit verschiedenen Aufheizraten

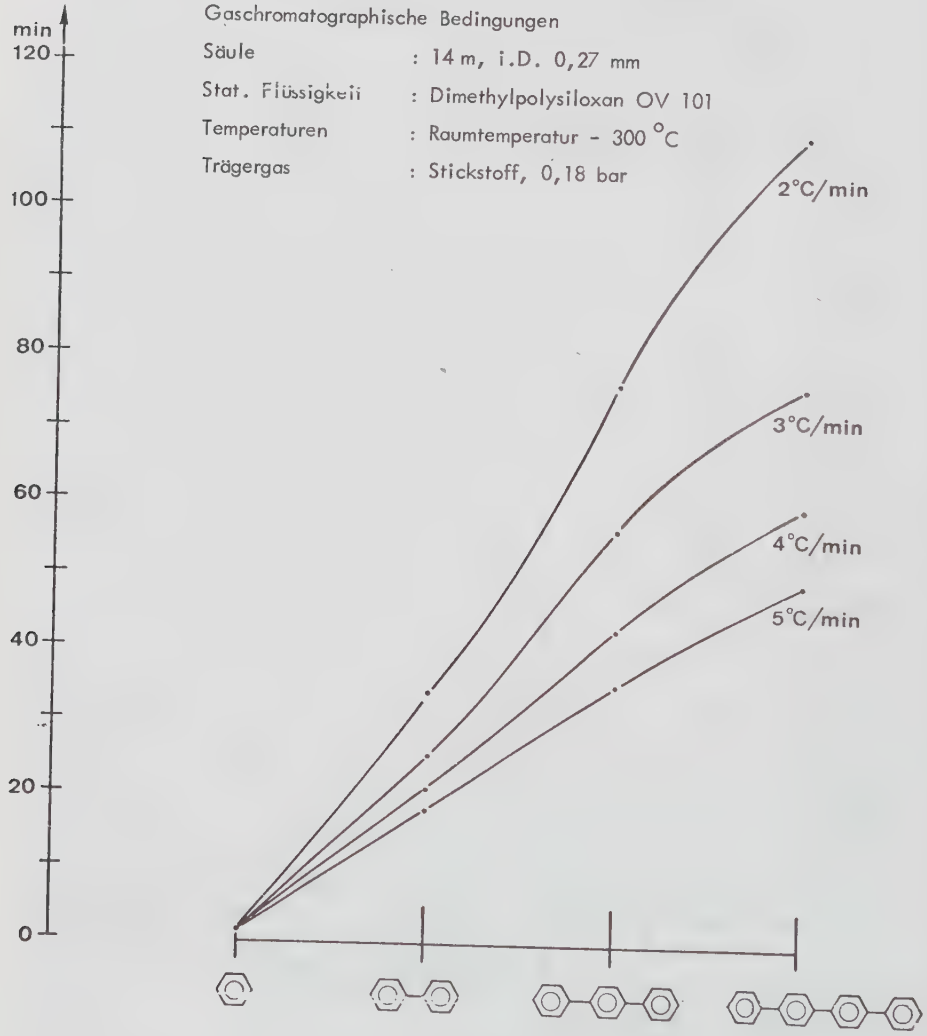
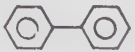
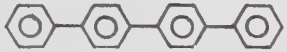


Tabelle 55: Gesamtretentionszeiten von Polyphenylen in Abhängigkeit von ihren Ringzahlen z bei linear temperaturprogrammierter Arbeitsweise mit verschiedenen Aufheizraten

Polyphenyl	2 °/min		3 °C/min		4 °C/min		5 °C/min	
	t_{m+s} [min.]	Differenz [min.]	t_{m+s} [0,2 sec]	Differenz [0,2 sec]	t_{m+s} [0,2 sec]	Differenz [0,2 sec]	t_{m+s} [0,2 sec]	Differenz [0,2 sec]
	3,0		563,1		572,7		555,3	
		13,9		7017,5		5682,6		4772,6
	16,9		7 580,6		6255,3		5327,9	
		21,0		8483,9		6461,8		5202,2
	37,9		16064,5		12717,1		10530,1	
		16,6		6630,1		5040,4		4076,7
	54,5		22694,6		17757,5		14606,8	
z = Anzahl der aromatischen Ringe	t_{m+s} = 17,55 z - 15,8 Korrel.Koeff.: 0,9973		t_{m+s} = 7487,8 z - 6993,9 Korrel. Koeff.: 0,9990		t_{m+s} = 5801,6 z - 5178,4 Korrel. Koeff.: 0.9990		t_{m+s} = 4735,7 z - 4084,2 Korrel. Koeff. : 0,9989	

GC-Bedingungen: Säule : 14 m, i.D. 0,27 mm
Stationäre Flüssigkeit : OV 101 (Dimethylpolysiloxan)
Temperaturen: Raumtemperatur - 300 °C
Trägergas : Stickstoff, 0,18 bar

Tabelle 56 a:

Indexwerte von zwei- und dreiringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen und ihren Derivaten bei verschiedenen Elutionstemperaturen

Gerät : Carlo Erba 2100
Säule : 90 m, i.D. 0,27 mm H 778 b
Stationäre Flüssigkeit : Dimethylpolysiloxan OV 101
Temperaturen : angegeben
Trägergas : Stickstoff; 0,12 m/sec

VERBINDUNG:	80,2 °C			90 °C		
	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)
Benzo[b]furan	981,83	0,08	0,26	985,85	0,02	0,06
Inden	1026,5	0,1	0,4	1031,28	0,03	0,08
1,2,3,4-Tetrahydro-naphthalin	1135,2	0,2	0,6	1140,55	0,02	0,06
Naphthalin	1153,5	0,15	0,5	1159,37	0,10	0,4
Benzo[b]thiophen	1159,6	0,16	0,5	1165,67	0,03	0,09
2-Methylnaphthalin	1255,0	0,1	0,4	1261,50	0,08	0,30
Azulen	1258,4	0,16	0,5	1265,8	0,08	0,3
1-Methylnaphthalin	1268,2	0,2	0,7	1274,6	0,1	0,4
Biphenyl	1332,7	0,1	0,4	1338,5	0,09	0,3
2-Äthylnaphthalin				1352,5	0,2	0,7
1-Äthylnaphthalin	1346,2	0,05	0,17	1353,2	0,2	0,7
2,6-Dimethylnaphthalin	1354,9	0,14	0,5	1361,6	0,1	0,4
2,7-Dimethylnaphthalin	1356,6	0,14	0,5	1363,3	0,1	0,4
1,3-Dimethylnaphthalin	1367,0	0,14	0,5	1373,9	0,4	1,3
1,7-Dimethylnaphthalin	1369,7	0,2	0,6	1376,63	0,07	0,2
2,3-Dimethylnaphthalin						
1,5-Dimethylnaphthalin						
Acenaphthylen	1384,8	0,16	0,5	1392,80	0,07	0,2
1,2-Dimethylnaphthalin	1394,5	0,3	1	1401,8	0,14	0,5
1,8-Dimethylnaphthalin	1409,7	0,14	0,5	1417,6	0,1	0,3
Acenaphthen	1413,4	0,2	0,8	1422,0	0,1	0,4
4-Methylbiphenyl				1443,2	0,2	0,7
Dibenzofuran				1454,7	0,3	0,9

Tabelle 56 a, Fortsetzung

Indexwerte von zwei- und dreringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen und ihren Derivaten bei verschiedenen Elutionstemperaturen

Gerät : Carlo Erba 2100
Säule : 90 m, i.D. 0,27 mm H 778 b
Stationäre Flüssigkeit : Dimethylpolysiloxan OV 101
Temperaturen : angegeben
Trägergas : Stickstoff; 0,12 m/sec

	100 °C			110 °C		
VERBINDUNG:	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)
Benzo[b]furan	989,64	0,02	0,08	993,67	0,03	0,09
Inden	1035,86	0,02	0,07	1040,66	0,09	0,25
1,2,3,4-Tetrahydro-naphthalin	1145,96	0,03	0,1	1151,60	0,01	0,04
Naphthalin	1163,93	0,04	0,12	1172,28	0,04	0,11
Benzo[b]thiophen	1171,73	0,04	0,12	1178,06	0,03	0,08
2-Methylnaphthalin	1267,90	0,02	0,07	1274,63	0,07	0,19
Azulen	1273,21	0,04	0,15	1281,01	0,04	0,13
1-Methylnaphthalin	1281,43	0,06	0,21	1288,60	0,09	0,26
Biphenyl	1344,08	0,02	0,07	1350,1	0,2	0,7
2-Äthylnaphthalin	1358,7	0,15	0,5	1365,6	0,4	1,2
1-Äthylnaphthalin	1359,8	0,16	0,6			
2,6-Dimethylnaphthalin	1368,23	0,08	0,27	1375,4	0,06	0,17
2,7-Dimethylnaphthalin	1370,0	0,1	0,3	1377,15	0,09	0,28
1,3-Dimethylnaphthalin				1388,4	0,2	0,6
1,7-Dimethylnaphthalin	1383,59	0,03	0,09	1391,3	0,2	0,8
2,3-Dimethylnaphthalin				1405,7	0,16	0,5
1,5-Dimethylnaphthalin				1406,7	0,2	0,7
Acenaphthylen				1409,49	0,08	0,24
1,2-Dimethylnaphthalin	1409,35	0,08	0,27	1417,6	0,24	0,8
1,8-Dimethylnaphthalin	1425,4	0,14	0,5	1433,8	0,2	0,5
Acenaphthen	1430,1	0,16	0,5	1439,0	0,15	0,5
4-Methylbiphenyl	1449,1	0,3	0,9	1455,6	0,15	0,5
Dibenzofuran	1462,6	0,3	1	1471,0	0,1	0,4

Tabelle 56 b:

Indexwerte von zwei- und dreiringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen und ihren Derivaten bei verschiedenen Elutionstemperaturen

Gerät : Varian 2740
Säule : 110 m, i.D. 0,27 mm H 695
Stat. Flüssigkeit : Dimethylpolysiloxan OV 101
Temperature : angegeben
Trägergas : Stickstoff; 0,12 m/sec

VERBINDUNG:	110°C M	S	W(95%)	120°C M	S	W(95%)
Benzo[b]furan	995,07	0,07	0,31			
Inden	1041,71	0,15	0,69			
Naphthalin	1173,97	0,04	0,19	1180,34	0,08	0,30
Benzo[b]thiophen	1180,32	0,08	0,19	1186,7	0,1	0,4
2-Methylnaphthalin	1276,12	0,01	0,04	1282,6	0,1	0,4
Azulen	1283,31	0,03	0,19	1290,7	0,5	2
1-Methylnaphthalin	1290,7	0,20	0,8	1297,47	0,05	0,2
Biphenyl	1351,76	0,25	1,1	1357,9	0,1	0,4
2-Äthylnaphthalin	1367,0	0,3	1,5	1374,0	0,05	0,18
1-Äthylnaphthalin	1368,2	0,3	1,5	1375,42	0,05	0,18
2,6-Dimethylnaphthalin	1376,3	0,4	2	1383,9	0,2	0,8
1,3-Dimethylnaphthalin	1389,10	-	-	1397,4	0,2	0,6
Diphenylmethan	1398,4	-	-	1405,0	0,3	1
1,4-Dimethylnaphthalin	1406,3	-	-	1414,23	0,07	0,26
2,3-Dimethylnaphthalin	1406,7	-	-	1415,0	0,2	0,8
1,5-Dimethylnaphthalin	1408,2	0,5	3	1416,58	0,04	0,17
Acenaphthylen	1412,2	0,4	2,6	1421,3	0,1	0,5
1,2-Dimethylnaphthalin	1419,4	0,4	2,6	1427,73	0,06	0,25
1,8-Dimethylnaphthalin	1435,42	0,35	2,1	1443,92	0,08	0,33
Acenaphthen	1440,8	0,3	1,6	1449,66	0,07	0,29
4-Methylbiphenyl	1456,7	-	-	1463,7	0,1	0,5
Dibenzofuran	1473,73	0,08	0,46	1482,1	0,1	0,5
2,3,6-Trimethylnaphthalin	1508	1	6	1515,6	0,15	0,6
Fluoren	1529,53	0,25	1,5	1538,4	0,2	0,8
9,10-Dihydroanthracen						
Dibenzothiophen						
Phenanthren						
Anthracen						

Tabelle 56 b: Fortsetzung

Gerät : Varian 2740
Säule : 110 m, i.D. 0,27 mm H 695
Stat. Flüssigkeit : Dimethylpolysiloxan OV 101
Temperaturen : angegeben
Trägergas : Stickstoff, 0,12 m/sec

VERBINDUNG:	130°C M	S	W(95%)	140°C M	S	W(95%)
Benzo[b]furan						
Inden						
Naphthalin	1186,53	0,2	0,6			
Benzo[b]thiophen	1192,9	0,2	0,6			
2-Methylnaphthalin	1289,4	0,2	0,6	1296,1	0,1	0,4
Azulen				1306,9	0,1	0,7
1-Methylnaphthalin	1304,4	0,14	0,5	1311,6	0,1	0,4
Biphenyl	1363,3	0,2	0,7	1369,36	0,08	0,31
2-Äthylnaphthalin	1380,0	0,14	0,5	1386,83	0,09	0,35
1-Äthylnaphthalin	1381,5	0,14	0,5	1388,59	0,09	0,35
2,6-Dimethylnaphthalin	1390,1	0,15	0,5	1397,3	0,1	0,5
1,3-Dimethylnaphthalin	1403,8	0,2	0,8	1411,1	0,1	0,4
Diphenylmethan	1409,8	0,1	0,4			
1,4-Dimethylnaphthalin	1421,0	0,15	0,5			
2,3-Dimethylnaphthalin						
1,5-Dimethylnaphthalin	1423,5	0,15	0,5	1431,4	0,1	0,5
Acenaphthylen	1429,0	0,2	0,7	1437,8	0,14	0,55
1,2-Dimethylnaphthalin	1434,8	0,14	0,5	1442,8	0,1	0,5
1,8-Dimethylnaphthalin	1451,5	0,2	0,7	1459,8	0,15	0,6
Acenaphthen	1457,7	0,2	0,8	1466,56	0,15	0,6
4-Methylbiphenyl	1469,50	0,06	0,24	1475,8	0,1	0,5
Dibenzofuran	1490,1	0,1	0,5	1498,7	0,2	0,7
2,3,6-Trimethylnaphthalin	1523,45	0,05	0,19	1531,4	0,1	0,4
Fluoren	1547,43	0,06	0,22	1556,5	0,15	0,6
9,10-Dihydroanthracen	1628,29	0,09	0,42	1637,2	0,16	0,6
Dibenzothiophen	1690,80	0,08	0,35	1701,8	0,2	0,7
Phenanthren	1714,87	0,06	0,29	1726,1	0,2	0,7
Anthracen	1723,34	0,07	0,32	1734,8	0,2	0,7

Abbildung 57 a:

Temperaturabhängigkeit der Kovats-Indices von einigen zwei- und dreiringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen und ihren Derivaten

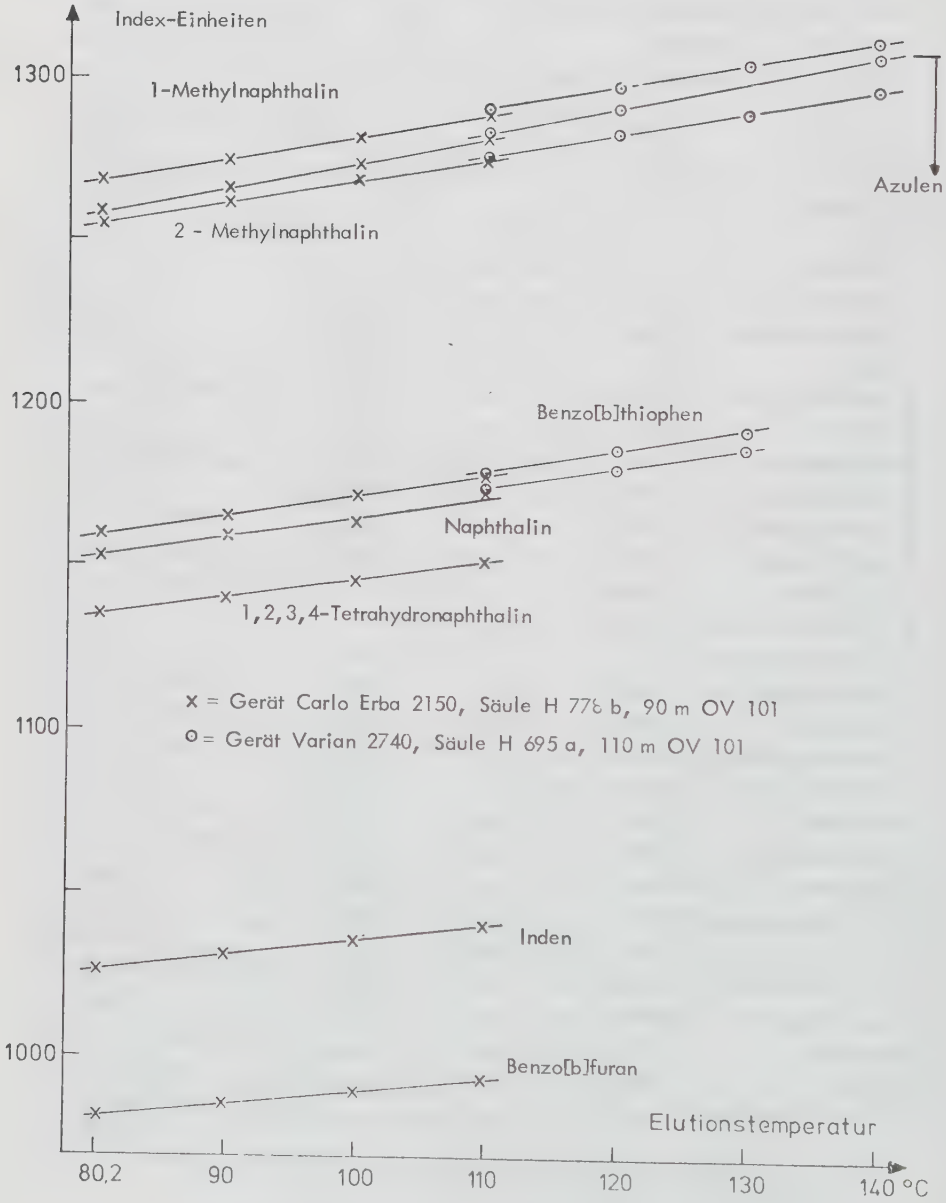


Abbildung 57 b:

Temperaturabhängigkeit der Kovats-Indices von einigen zwei- und dreiringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen und ihren Derivaten

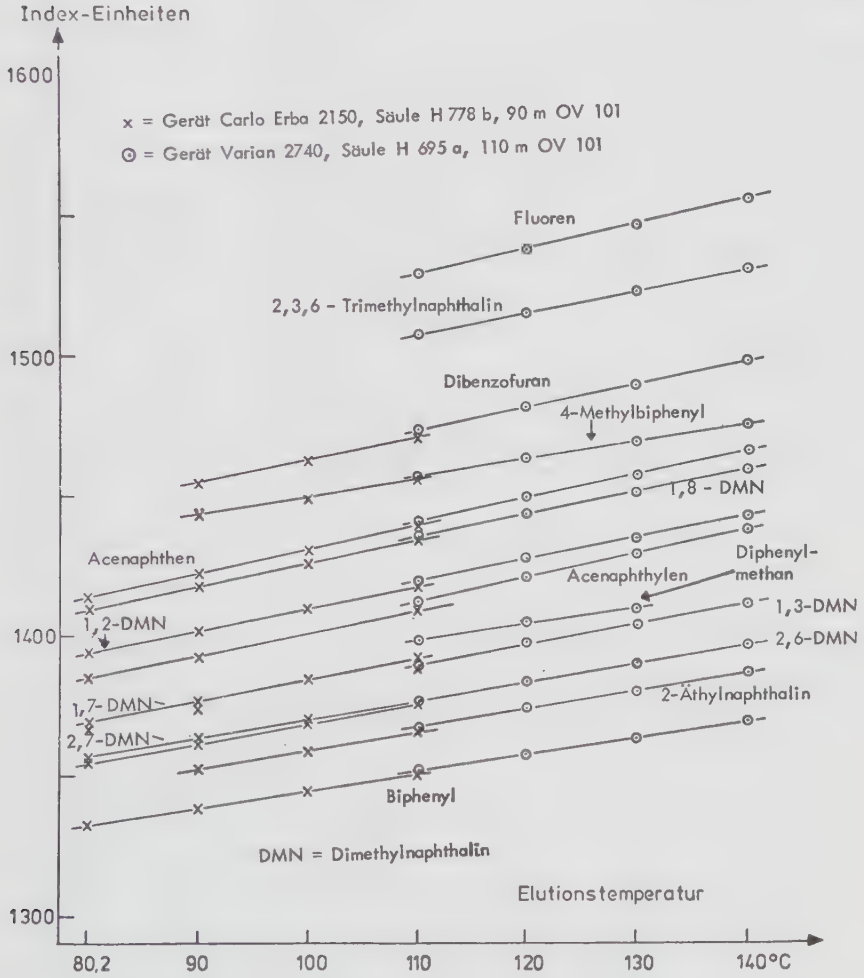


Tabelle 58:

Vergleich der Kovats-Indexwerte von bicyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen

Stationäre Flüssigkeit: $C_{87}H_{176}$

Säulentemperatur : 130 °C

Verbindung	eigene Versuche 25 m Glaskapillarsäule 2,67 mg stat. Phase			Kovats et al.[276] 2,4 m gepackte Säule 2,58g u. 4,01 g stat. Phase	
	M	S	Varianz	M	Varianz
1,2,3,4-Tetrahydro-naphthalin	1192,06	0,08	0,006	1189,7	1 - 2
Naphthalin	1218,1	0,2	0,04	1215,4	1 - 2
Azulen	1332,2	0,2	0,04	1331,2	1 - 2

Tabelle 59:

Indexwerte von dreiringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen und ihren heterocyclischen Derivaten in Abhängigkeit von der Elutionstemperatur (vergleiche Abbildung 33a)

Säule : 29 m, i.D. 0,27 mm
Stationäre Flüssigkeit : Dexsil 400 (Methyl-/Phenylpolycarboransiloxan)
Elutionstemperaturen : 170 und 190 °C
Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

Verbindung	170 °C			190 °C			$\Delta I / 10\,^{\circ}C$	
	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)	M	S
Dibenzothiophen	1874,0	0,2	0,8	1904,3	0,2	0,7	15,2	0,1
Phenanthren	1900,4	0,2	0,7	1932,0	0,2	0,6	15,8	0,1
Anthracen	1908,7	0,3	0,9	1941,2	0,2	0,2	16,3	0,2
Benzo[h]chinolin	1915,6	0,4	1,2	1947,6	0,2	0,7	16,0	0,2
Acridin	1927,9	0,3	1,0	1960,2	0,2	0,5	16,2	0,2
Benzo[f]chinolin	1957,6	0,2	0,7	1992,5	0,1	0,3	17,5	0,1
Benzo[c]chinolin	1907,1	0,1	0,3	--	--	--	--	--
Carbazol	1954,9	0,4	1,3	1974,4	0,2	0,5	9,8	0,2
N-Äthylcarbazol	1976,2	0,4	1,0	1986,3	0,2	0,6	5,1	0,2
9,10-Dihydroacridin	1980,7	0,4	1,2	1993,8	0,1	0,3	6,6	0,2

Tabelle 60:

Indexwerte von dreiringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen und ihren heterocyclischen Derivaten (vergleiche Abbildung 41)

Säule : 22 m, i.D. 0,27 mm
Stationäre Flüssigkeit: Superox-4 (Polyäthylenglykol)
Temperatur : 230 °C
Trägergas : Stickstoff, 0,11 m/sec

Verbindung	Index		
	M	S	W(95%)
Dibenzothiophen	2661	2	5
Phenanthren	2707	2	5
Anthracen	2712	2	5
N-Äthylcarbazol	2751,1	0,9	2,9
Benzo[h]chinolin	2765	1	3
Acridin	2855,0	0,4	1,2
Benzo[f]chinolin	2901,6	0,6	1,9
9,10-Dihydroacridin	3042	1	4
Carbazol	3210	3	10

Tabelle 61 : Indexwerte von 4-6ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen in einer Steinkohlenteermatrix

Säulen : Längen $\geq$ 25 m, i.D. 0,27 mm

Stat. Flüssigkeiten : Dimethylpolysiloxane unterschiedlichen Polymerisationsgrades

Elutionstemperatur : 250 °C

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

	Stationäre Phase: SE 30 (100 % Methyl)			OV 101 (100 % Methyl)		
VERBINDUNG :	M	S	W (95%)	M	S	W (95%)
4,5-Methylphenanthren				2006,8	0,3	1,0
Fluoranthen	2115	1	5	2117,1	0,5	2,0
Pyren	2163	1	4	2166,8	0,6	2
Benzo[a]fluoren	2240	1	3	2245,3	0,3	0,9
Benzo[b]fluoren +)	2256,0	0,9	3	2260,9	0,3	1
Benzo[c]phenanthren						
Benzo[a]anthracen	2451	1	3	2452,5	0,5	1
Chrysen ++)	2460	1	4	2460,0	0,5	2
Benzo[b]fluoranthen / Benzo[j]fluoranthen	2722	2	5	2726,3	0,7	2
Benzo[k]fluoranthen	2726	1	5	2730,7	0,6	2
Benzo[e]pyren	2779	1	4	2781,1	0,5	2
Benzo[a]pyren	2791	2	6	2791,3	0,4	2
Perylen	2807	1	4	2809,2	0,4	1
Indeno[1,2,3-c,d]pyren	3046	2	5	3052,6	0,5	2
Benzo[g,h,i]Perylen	3094	2	7	3100,6	0,5	2
Anthanthren	3119	2	5	3127,1	0,6	2

+ mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren

++ mit ca. 30 % Triphenylen

Tabelle 61, Fortsetzung:

Indexwerte von 4-6ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen in einer Steinkohlenteermatrix

Säulen : Längen $\geq$ 25 m

Stat. Flüssigkeiten : Methyl-/Phenylpolysiloxane

Elutionstemperatur : 250 °C

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

VERBINDUNG :	SE 52 95 % Methyl 5 % Phenyl			OV 3 90 % Methyl 10 % Phenyl		
	M	S	W (95%)	M	S	W (95%)
4,5-Methylphenanthren	2049,7	0,7	2			
Fluoranthen	2174,9	0,2	0,6	2200,5	0,7	2
Pyren	2228,9	0,2	0,6	2258,0	0,4	1
Benzo[a]fluoren	2305,1	0,5	1,5	2340,2	0,7	2
Benzo[b]fluoren +)	2320,9	0,5	2	2354,8	0,8	3
Benzo[c]phenanthren	2467,8	0,8	3	2503	1	4
Benzo[a]anthracen	2526,1	0,6	2	2556	1	4
Chrysen ++)	2540,2	0,7	2	2567	1	3
Benzo[b]fluoranthen	2810,9	0,9	3			
				2834	1	3
Benzo[j]fluoranthen	2817,6	0,9	3			
Benzo[k]fluoranthen	2828,3 +++)	1,3	4	2839	1	3
Benzo[e]pyren	2867,8	0,6	2	2898	1	3
Benzo[a]pyren	2892	2	5	2911	1	4
Perylen	2906	2	7	2931	1	3
Indeno[1,2,3-c,d]pyren	3176	2	5	3172	1	4
Benzo[g,h,i]Perylen	3207,3	1	4	3233	1	4
Anthanthren				3251	1	4

\+ mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren

++ mit ca. 30 % Triphenylen

+++ mit weiterem $C_{20}H_{12}$-Isomer

Tabelle 61, Fortsetzung:

Indexwerte von polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen in einer Steinkohlenteermatrix

Säulen : Längen ≥ 30 m, i.D. 0,27 mm

Stat. Flüssigkeiten : Methyl-/Phenylpolysiloxane

Elutionstemperatur : 250 °C

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

VERBINDUNG :	OV 7 80 % Methyl 20 % Phenyl			OV 61 67 % Methyl 33 % Phenyl		
	M	S	W (95%)	M	S	W(95%)
4,5-Methylphenanthren						
Fluoranthen	2289,6	0,7	2	2457,0	0,9	3
Pyren	2351,8	0,7	2	2529	1	4
Benzo[a]fluoren						
Benzo[b]fluoren +)						
Benzo[c]phenanthren						
Benzo[a]anthracen	2661,2	0,8	3	2849	1	4
Chrysen ++)	2675,0	0,9	3	2869	1	4
Benzo[b]fluoranthen	2953,9	0,6	2	3154	1	4
Benzo[j]fluoranthen				3162	1	4
	>2960,7	0,6	2			
Benzo[k]fluoranthen				3168	1	4
Benzo[e]pyren	3025,9	0,6	2	3224	1	4
Benzo[a]pyren	3038,5	0,6	2	3257	2	5
Perylen	3061,9	0,9	3	3286	2	5
Indeno[1,2,3-c,d]pyren	3312,4	0,7	2	3539	1	4
Benzo[g,h,i]Perylen	3370,4	0,6	2	3606,8	0,4	1
Anthanthren				3638,5	1	4

+ mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren

++ mit ca. 30 % Triphenylen

Tabelle 62:

Differenzen ΔI von 4- bis 6ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen für verschieden polare Polysiloxanphasen

Säulentemperatur: 250 °C — übrige GC-Bedingungen: siehe Tabelle 61

Verbindung	$\Delta I = I_{SE\ 52} - I_{SE\ 30}$		$\Delta I = I_{OV\ 3} - I_{SE\ 30}$		$\Delta I = I_{OV\ 7} - I_{SE\ 30}$		$\Delta I = I_{OV\ 61} - I_{SE\ 30}$	
	M	S	M	S	M	S	M	S
Fluoranthen	59,9	1,0	85,5	1,2	174,6	1,2	342,0	1,3
Pyren	65,9	1,0	95,0	1,1	188,8	1,2	366,0	1,4
Benzo[a]fluoren	65,1	1,1	100,2	1,2	---	---	----	---
Benzo[b]fluoren +	64,9	1,0	98,8	1,2	---	---	----	---
Benzo[a]anthracen	75,1	1,2	105,0	1,4	210,2	1,3	398,0	1,4
Chrysen ++	80,2	1,2	107,0	1,4	215,0	1,8	409,0	1,4
Benzo[e]pyren	88,8	1,2	119,0	1,4	246,9	1,2	445,0	1,4
Benzo[a]pyren	101	3	120	2	247,5	2,1	466	3
Perylen	101	2	124	1,4	254,9	1,8	479	2
Indeno[1,2,3-c,d]pyren	130	3	126	2	266,4	2,1	493	2
Benzo[g,h,i]perylen	113	2	139	2	276,4	2,1	512,8	2,0
Anthanthren	---	--	132	2	-----	---	519,5	2,2

+ mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren

++ mit ca. 30 % Triphenylen

Abbildung 59 : Temperaturabhängigkeit der Kovats-Indices von einigen vierringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen

* mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren ** mit ca. 30 % Triphenylen

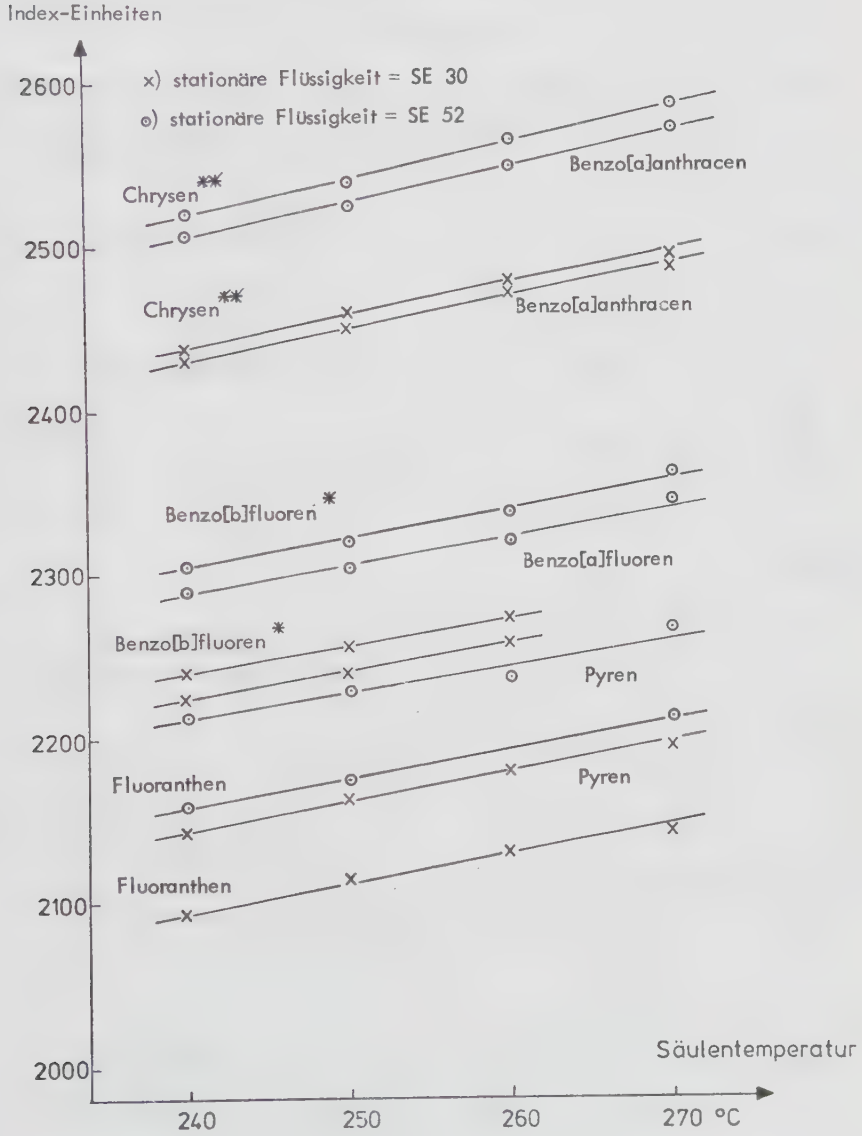


Abbildung 59 b:

Temperaturabhängigkeit der Kovats-Indices von einigen fünf- und sechsringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen in einer Steinkohlenteermatrix

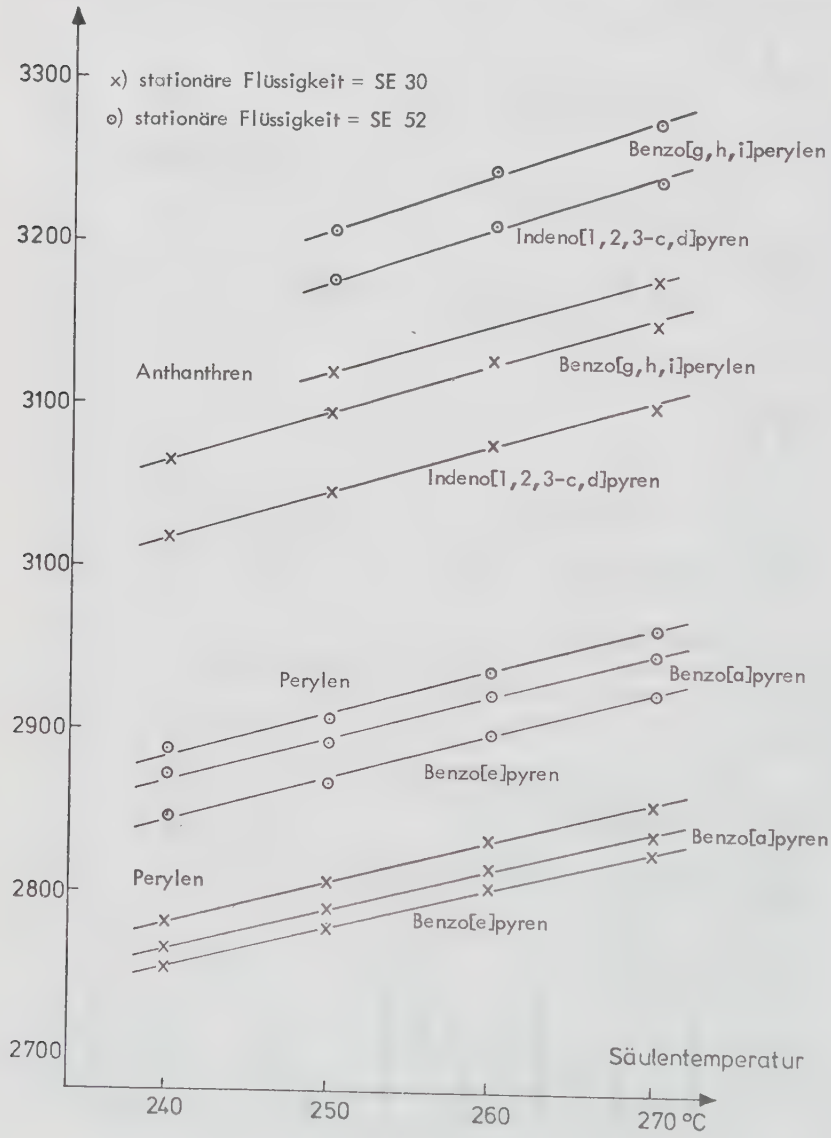


Tabelle 63: Indexwerte von vier- bis sechsringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen in einer Steinkohlenteermatrix bei verschiedenen Elutionstemperaturen

Säulen : Längen $\geq$ 30 m, i.D. 0,27 mm

Stationäre Flüssigkeiten: SE 30 (Dimethylpolysiloxan)

SE 52 (Methyl-/Phenylpolysiloxan)

Säulentemperatur 240 °C

Verbindung	Stationäre Phase: SE 30			Stationäre Phase: SE 52		
	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)
Fluoranthen	2093,3	1	4	2158,6	0,1	0,4
Pyren	2143	1	4	2213,5	0,1	0,4
Benzo[a]fluoren	2224,7	0,7	2	2290,1	0,1	0,5
Benzo[b]fluoren +)	2239,6	0,7	2	2305,4	0,2	0,6
Benzo[c]phenanthren				2451,0	0,2	0,6
Benzo[a]anthracen	2431,2	0,8	3	2507,6	0,2	0,6
Chrysen ++)	2438,4	0,8	3	2521,5	0,2	0,7
Benzo[b]fluoranthen				2789,2	0,2	0,7
	2696,9	0,9	3			
Benzo[j]fluoranthen				2796,8	0,3	1
Benzo[k]fluoranthen	2701,2	0,7	2	2808,5	0,3	0,9
Benzo[e]pyren	2753,8	0,9	3	2847,2	0,2	0,7
Benzo[a]pyren	2764,3	1	3	2872,3	0,3	1
Perylen	2782,2	0,8	3	2886,9	0,4	2
Indeno[1,2,3-c,d]pyren	3018	1	4			
Benzo[g,h,i]Perylen	3065	1	4			

\+ mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren ++ mit ca. 30 % Triphenylen

Säulentemperatur 250 °C: siehe Tabelle 61

Tabelle 63, Fortsetzung:

Indexwerte von vier- bis sechsringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen in einer Steinkohlenteermatrix bei verschiedenen Elutionstemperaturen

Säulen : SE 30 (Dimethylpolysiloxan)

Stationäre Flüssigkeiten: SE 52 (Methyl-Phenylpolysiloxan)

Säulentemperatur 260 °C

Verbindung	Stationäre Phase: SE 30			Stationäre Phase: SE 52		
	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)
Fluoranthen	2131	1	3			
Pyren	2180,1	0,9	3	2237,7	0,5	1
Benzo[a]fluoren	2258,8	0,5	2	2321,2	0,6	2
Benzo[b]fluoren +)	2275,1	0,4	2	2338,7	0,7	2
Benzo[a]anthracen	2473,0	1	3	2551,0	0,7	2
Chrysen ++)	2481,0	0,9	2	2565,9	0,7	2
Benzofluoranthene	2747	1	4			
Benzo[b]fluoranthen				2838,1	1	3
Benzo[j]fluoranthen				2845,2	1	3
Benzo[k]fluoranthen				2854,5	1	4
Benzo[e]pyren	2805,1	0,8	2	2898,4	1	3
Benzo[a]pyren	2817	1	4	2922	1	4
Perylen	2833,7	0,5	2	2937	1	4
Indeno[1,2,3-c,d]pyren	3076,1	0,9	3	3210	2	6
Benzo[g,h,i]Perylen	3126	0,7	2	3244	2	5

+ mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren ++ mit ca. 30 % Triphenylen

Säulentemperatur 250 °C: siehe Tabelle 61

Tabelle 63, Fortsetzung

Indexwerte von 4- bis 6ringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen in einer Steinkohlenteermatrix bei verschiedenen Temperaturen

Säulen : Längen 25 m, i.D. 0,27 mm

Stationäre Flüssigkeiten: SE 30 und OV 101 (Dimethylpolysiloxane) und SE 52 (Methyl-/phenylpolysiloxan)

Säulentemperatur: 270 °C	Stationäre Phase: SE 30			Stationäre Phase: OV 101			Stationäre Phase: SE 52		
Verbindung	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)
Fluoranthen	2143,8	0,2	0,5	2145,1	0,7	2	2213,5	0,4	1
Pyren	2195,6	0,2	0,5	2196,0	0,7	2	2268,0	0,5	1,5
Benzo[a]fluoren							2346,3	0,4	1
Benzo[b]fluoren +)							2363,3	0,5	1,3
Benzo[a]anthracen	2488,8	0,2	0,7	2490,8	0,8	2	2573,8	0,5	1,6
Chrysen ++)	2496,8	0,2	0,6	2499,0	0,9	3	2589,1	0,5	1,7
Benzofluoranthene	2765,3	0,5	1,4						
Benzo[b]fluoranthen							2861,2	0,6	2
				2772,0	0,7	2			
Benzo[j]fluoranthen							2868,2	0,7	2
Benzo[k]fluoranthen							2876,8	0,8	2,5
Benzo[e]pyren	2826,9	0,2	1	2833,1	0,5	1,6	2924,2	0,8	2,5
Benzo[a]pyren	2837,9	0,4	1,3	2844,6	0,6	2	2947,8	0,9	3
Perylen	2855,7	0,4	1,3	2861,6	0,5	1,6	2963,2	0,9	3
Indeno[1,2,3-c,d]pyren	3099,1	0,3	1	3107	1	4	3237	1,4	4
Benzo[g,h,i]perylen	3149,9	0,3	1	3159,1	0,7	2	3273,6	1,4	4
Anthanthren	3176,7	0,3	1	3187,9	0,5	1,7	3297,4	0,5	1,6

+ mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren ++ mit ca. 30 % Triphenylen Säulentemperatur 250 °C: siehe Tabelle 61

Tabelle 64: Indexwerte von vier- bis sechsringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen in einer Steinkohlenteermatrix in einigen stationären Polycarboransiloxanphasen bei verschiedenen Elutionstemperaturen

Säulen : Längen 30 m (Dexsil 400 und 410) und 50 m (Dexsil 300), i.D. 0,27 mm

Stationäre Flüssigkeiten: Dexsil 300, Dexsil 400, Dexsil 410

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

Elutionstemperatur : 250 °C

Verbindung	stat. Phase Dexsil 300			stat. Phase Dexsil 400			stat. Phase Dexsil 410		
	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)
4.5-Methylenphenanthren	2118.6	0.6	1.8	2210.5	2.3	7.4	2208.5	1.6	5.1
Fluoranthen	2282.5	0.7	2.3	2333.4	0.7	2.4	2334.3	2.3	7.4
Pyren	2337.4	0.8	2.6	2390.6	1.7	5.4	2384.2	2.6	8.3
Benzo[a]fluoren	2406.6	0.6	2.1	2464.0	0.8	2.5	2454.8	2.8	9.0
Benzo[b]fluoren +	2420.7	0.9	2.8	2480.2	0.7	2.1	2473.7	2.9	9.3
Benzo[c]phenanthren				2637.1	0.8	2.6	2629.6	2.5	8.0
Benzo[a]anthracen	2636.3	1.2	3.8	2701.2	0.8	2.7	2700.3	2.8	9.0
Chrysen ++	2645.6	1.4	4.4	2712.3	0.8	2.6	2709.1	2.8	9.0
Benzo[b]fluoranthene	2936.0	1.6	5.0	3007.1	0.5	1.5	3011.8	2.7	8.6
Benzo[k] + [j]-fluoranthen	2936.0	1.6	5.0	3010.0	0.5	1.7	3011.8	2.7	8.6
Benzo[e]pyren	3005.9	0.8	2.7	3078.7	0.6	1.9	3076.7	3.0	9.6
Benzo[a]pyren	3012.4	1.0	3.0	3087.3	0.7	2.1	3083.9	3.0	9.6
Perylen	3036.9	1.1	3.4	3113.6	0.6	1.9	3109.0	3.2	10.2
Indeno[1,2,3-c,d]pyren	3289.4	1.0	3.2	3369.5	0.4	1.4	3371.6	3.3	10.6
Benzo[g,h,i]perylen	3346.2	1.0	3.2	3429.0	0.5	1.5	3427.5	3.3	10.6
Anthanthren	3371.6	1.1	3.5	3457.4	0.5	1.5	3452.5	3.5	11.2

+ mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren ++ mit ca. 30 % Triphenylen

Tabelle 64, Fortsetzung: Indexwerte von vier- bis sechsringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen in einer Steinkohlenteermatrix in einigen stationären Polycarboransiloxanphasen bei verschiedenen Elutionstemperaturen

Säulen : Längen 30 m (Dexsil 400 und 410) und 50 m (Dexsil 300), i.D. 0,27 mm

Stationäre Flüssigkeiten: Dexsil 300, Dexsil 400, Dexsil 410

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

Elutionstemperatur : 270 °C

Verbindung	stat. Phase Dexsil 300			stat. Phase Dexsil 400			stat. Phase Dexsil 410		
	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)	M	S	W(95%)
Fluoranthen	2316.8	0.6	1.8	2385.9	0.2	0.6	2361.0	1.3	4.2
Pyren	2381.7	0.9	2.7	2441.7	0.2	0.5	2417.3	1.5	4.8
Benzo[a]fluoren	2444.0	0.8	2.3	2508.5	0.1	0.4			
Benzo[b]fluoren +	2459.4	1.2	4.0	2524.3	0.1	0.4			
Benzo[c]phenanthren				2688.0	0.1	0.4	2662.6	1.2	4.0
Benzo[a]anthracen	2682.2	0.9	2.9	2756.3	0.2	0.5	2736.1	1.4	4.4
Chrysen ++	2692.8	1.0	3.2	2770.2	0.2	0.7	2746.4	1.4	4.6
Benzo[b]fluoranthene	2994.4	0.7	2.9				3053.4	1.5	4.9
Benzo[i]+[k]fluoranthen	2994.4	0.7	2.9	3070.9	0.4	1.2	3053.4	1.5	4.9
Benzo[e]pyren	3063.1	0.3	1.0	3145.7	0.2	0.7	3122.7	1.5	4.7
Benzo[a]pyren	3070.8	0.3	1.3	3155.4	0.2	0.7	3130.4	1.6	5.0
Perylen	3095.6	0.3	1.2	3182.8	0.2	0.7	3156.5	1.5	4.9
Indeno[1,2,3-c,d]pyren	3358.0	1.3	4.2	3445.4	0.3	1.0	3425.8	1.4	4.5
Benzo[g,h,i]perylen	3419.8	1.5	4.6	3508.0	0.4	1.1	3483.2	1.4	4.5
Anthanthren	3446.1	1.6	5.5	3537.2	0.3	0.9	3509.3	1.2	3.9

+ mit ca. 30 % Benzo%c]fluoren ++ mit ca. 30 % Tiiphenylen

Tabelle 65: Temperaturabhängigkeit der Kovats-Indices von einigen vier- bis sechsringigen aromatischen Kohlenwasserstoffen in einigen stationären Polycarboransiloxanphasen

GC-Bedingungen: siehe Tabelle 64

Verbindung	stat. Phase Dexsil 300 I/10 °C		stat. Phase Dexsil 400 I/10 °C		stat. Phase Dexsil 410 I/10 °C	
Fluoranthen	17.2	0.5	26.3	0.4	13.4	1.3
Pyren	22.2	0.6	25.6	0.9	16.6	1.5
Benzo[a]fluoren	18.7	0.5	22.3	0.4		
Benzo[b]fluoren +	19.4	0.8	22.1	0.4		
Benzo[c]phenanthren			25.3	0.4	16.5	1.4
Benzo[a]anthracen	23.0	0.8	27.6	0.4	17.9	1.6
Chrysen ++	23.6	0.9	28.7	0.4	18.7	1.6
Benzo[b]fluoranthene	29.2	0.9			20.8	1.5
Benzo[k]fluoranthen	29.2	0.9	30.5	0.3	20.8	1.5
Benzo[j]fluoranthen	29.2	0.9	30.5	0.3	20.8	1.5
Benzo[e]pyren	28.6	0.4	33.5	0.3	23.0	1.7
Benzo[a]pyren	29.2	0.5	34.1	0.4	23.3	1.7
Perylen	29.4	0.6	34.6	0.3	23.8	1.8
Indeno[1,2,3-c,d]pyren	34.3	0.8	38.0	0.3	27.1	1.8
Benzo[g,h,i]perylen	36.8	0.9	39.5	0.3	27.9	1.8
Anthanthren	37.3	1.0	39.9	0.3	28.4	1.9

+ mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren

++ mit ca. 30 % Triphenylen

Tabelle 66 :

Differenzen von Indexwerten ΔI von polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen zwischen verschieden substituierten Polycarboransiloxanen und dem Dimethylpolysiloxan SE 30.

Säulentemperatur : 250 °C

Übrige gaschromatographische Parameter : siehe Tabellen 61 und 64

Verbindung	$\Delta I = I_{Dexsil\ 300} - I_{SE\ 30}$		$\Delta I = I_{Dexsil\ 400} - I_{SE\ 30}$		$\Delta I = I_{Dexsil\ 410} - I_{SE\ 30}$	
	M	S	M	S	M	S
Fluoranthen	167,5	1,2	218,4	1,2	219	3
Pyren	174,4	1,3	227,6	2,0	221	3
Benzo[a]fluoren	166,6	1,2	224,0	1,3	215	3
Benzo[b]fluoren +	164,7	1,3	224,2	1,1	218	3
Benzo[a]anthracen	185,3	1,6	250,2	1,3	249	3
Chrysen ++	185,6	1,7	252,8	1,3	249	3
Benzo[e]pyren	126,9	1,3	299,7	1,2	298	3
Benzo[a]pyren	221	2	296	2	293	4
Perylen	229,9	1,3	306,6	1,2	302	3
Indeno[1,2,3-c,d]pyren	234,4	2	323,5	2,0	326	4
Benzo[g,h,i]perylen	252	2	335	2	334	4
Anthanthren	253	3	338	2	334	4

+) mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren ++) mit ca. 30 % Triphenylen

Tabelle 67:

Temperaturabhängigkeit der Kovats-Indices von polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen in der stationären Flüssigkeit PPE 20 (Poly-m-Phenyläther)

Säule : 30 m, i.D. 0,27 mm

Stationäre Flüssigkeit: PPE 20 (Polyphenyläther), Filmdicke 300 nm

Temperaturen : 250 und 270 °C

Trägergas : Wasserstoff, 0,35 m/sec

Verbindung	250 °C		270 °C		I / 10 °C	
	M	S	M	S	M	S
Dibenzothiophen	2629,1	0,8	2693	1	32	0,6
Phenanthren	2669	1	2737	1	34	1
Anthracen	2678	1	2748	1	35	1
4H-Cyclopenta[d,e,f]-phenanthren	2833,8	0,9	2906	1	36,1	0,7
Fluoranthen	3038	1	3118	1	40	1
Pyren	3131	1	3220	2	44,5	2
Benzo[a]fluoren	3205,3	0,8	3286	1	40,4	0,6
Benzo[b]fluoren	3218	1	3300	1	41	1
Benzo[c]fluoren	3224,0	0,9	3306	2	41	1,1
Benzo[c]phenanthren	3424	1	3517	1	46,5	1
Benzo[a]anthracen	3524	1	3620	1	48	1
Chrysen	3547	1	3644	1	48,5	1
Triphenylen	3564	1	3660	1	48	1
Benzo[e]pyren	4031	2	4150	2	59,5	1
Benzo[a]pyren	4036	2	4155	3	59,5	2
Perylen	4086		4208	2	61	

Tabelle 68:

Differenzen der Indexwerte ΔI von polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen zwischen der polaren stationären Flüssigkeit PPE 20 und der unpolaren stationären Flüssigkeit SE 30 bei verschiedenen Elutionstemperaturen

Temperaturen : 250 und 270 °C

übrige GC-Bedingungen: siehe Tabellen 61 und 67

	$\Delta I = I_{PPE\ 20} - I_{SE\ 30}$		$\Delta I = I_{PPE\ 20} - I_{SE\ 30}$	
	M	S	M	S
Fluoranthen	923	1	974	1
Pyren	968	1	1024	2
Benzo[a]fluoren	965	1		
Benzo[b]fluoren +	962	1		
Benzo[a]anthracen	1073	1	1131	1
Chrysen ++	1096	1	1147	1
Benzo[e]pyren	1240	2	1323	2
Benzo[a]pyren	1245	2	1317	3
Perylen	1279		1352	1,5

\+ in SE 30 mit ca. 30 % Benzo[c]fluoren

++ in Se 30 mit ca. 30 % Triphenylen

Abbildung 60:

Elutionsverhalten von mehr als vierzig polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen und Derivaten von der polaren und extrem temperaturstabilen stationären Flüssigkeit Poly S 179

Probe	: Testsubstanzen, Zuordnung siehe Tabellen 69 und 70
Säule	: 92 m, i.D. 0,27 mm
Stationäre Phase	: Poly S 179 (Polysulfonphenyläther)
Trägergas	: Wasserstoff, 0,35 m/sec bei 390 °C
Temperatur	: 200 - 390 °C, 1°C / min.

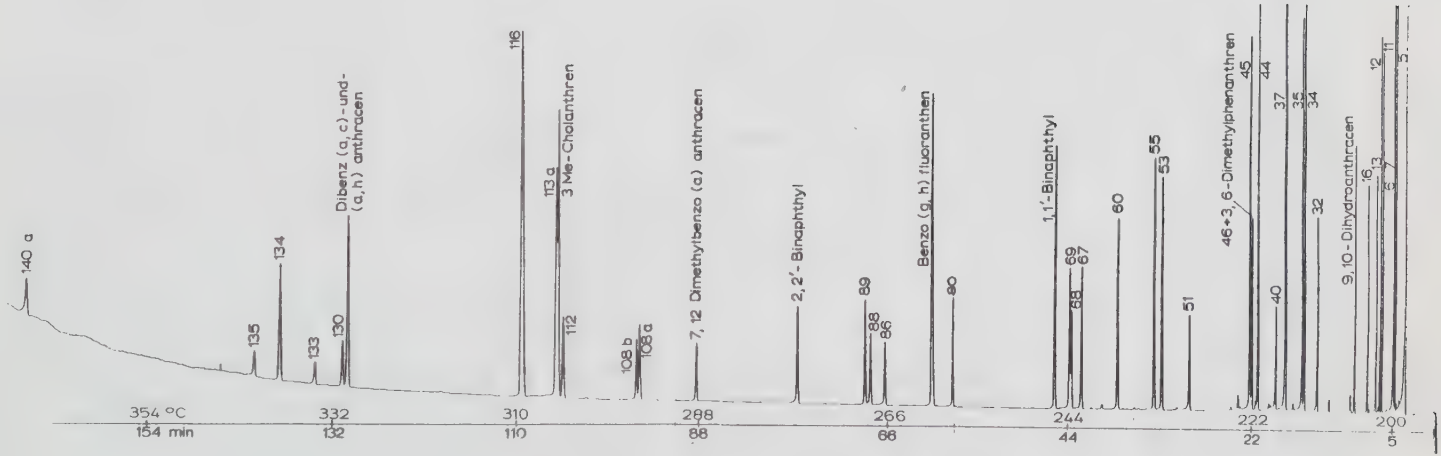


Abbildung 61 : Analyse von Steinkohlenhochtemperaturteer mit hochauflösenden Glaskapillarsäulen auch in der GC-MS-Kombination

a: Gesamtchromatogramm, Zuordnung Tabellen 69 und 70

Probe : Steinkohlenhochtemperaturteer

Stationäre Phase: Poly S 179 (Polysulfonphenyläther)

Temperaturen : 200 - 390 °C, 1°C/min; in der GC-MS-Kopplung bis 360 °C

Trägergase : Wasserstoff, 0,35 m/sec bei 390 °C bzw. Helium, maximaler Durchfluß 4 ml/min.

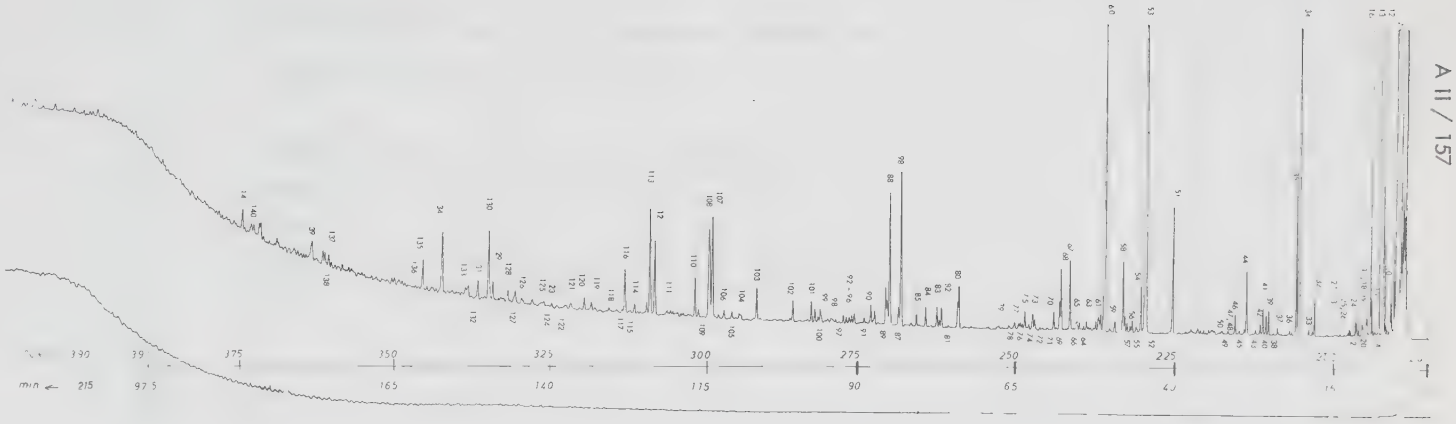


Abbildung 61 : Analyse von Steinkohlenhochtemperaturteer mit hochauflösenden Glaskapillarsäulen auch in der GC-MS-Kombination

b: Ausschnitt des Bereichs leichtflüchtiger Substanzen vom Gesamtchromatogramm

Zuordnung Tabellen 69 und 70

Probe : Steinkohlenhochtemperaturteer

GC-Bedingungen: siehe Abbildung 61 a

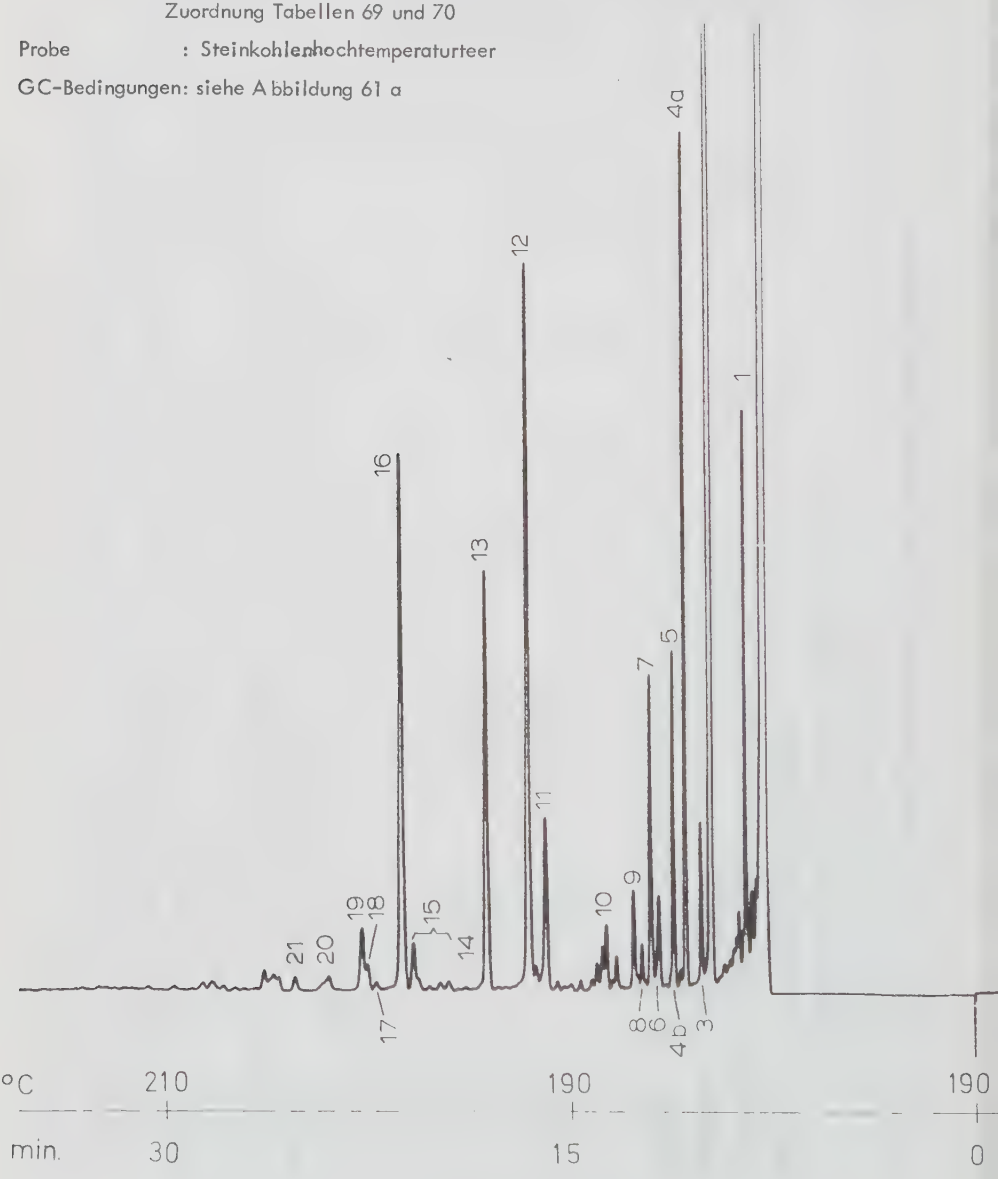


Abbildung 61: Analyse von Steinkohlenhochtemperaturteer mit hochauflösenden Glaskapillarsäulen auch in der GC-MS-Kopplung

c: Ausschnitt des Totalionenstromchromatogramms von der Benzpyren-Fraktion

Probe : Steinkohlenhochtemperaturteer

Temperaturbereich: 300 - 315 °C, übrige GC-Bedingungen siehe Abbildung 61 a

Zuordnung : 107, 108 Benzofluoranthene

110 $C_{20}H_{12}$-Isomer

112 Benzo[e]pyren

113 Benzo[a]pyren

116 Perylen

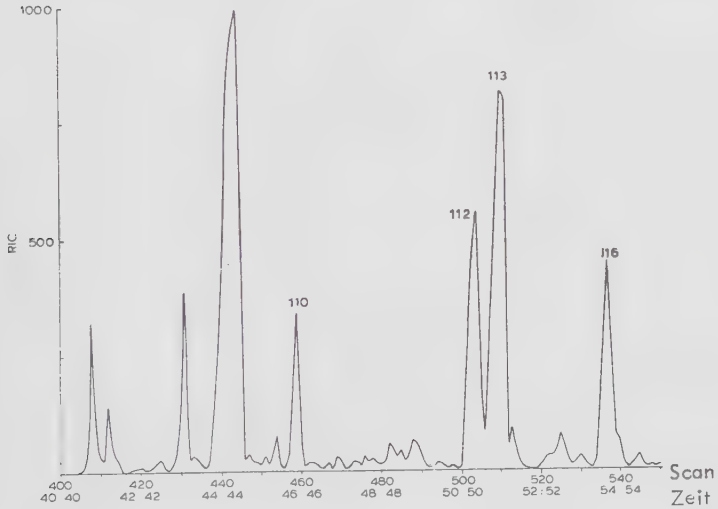


Tabelle 69 :

Elutionsreihenfolgen von einigen polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen von schwach polaren Methyl-/Phenylpolysiloxanen sowie von dem sehr polaren Polysulfonphenyläther Poly S 179

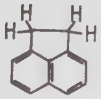
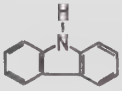
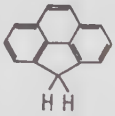
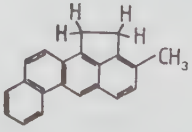
Verbindung	Struktur	Elutionsreihenfolge OV 101, SE 54, OV 7, OV 61	Elutionsreihenfolge Poly S 179
Acenaphthylen		1	2
Acenaphthen		2	1
Carbazol		1	2
4-H-Cyclopenta[d,e,f]-phenanthren		2	1
Benzo[e]pyren		1	1
Benzo[a]pyren		2	3
Perylen		3	4
3-Methylcholanthren		4	2

Tabelle 70: Zordnung der Peaks in den Abbildungen 60, 61 und 63

Peak	Molekular-gewicht	Verbindung	Bemerkung
1	116	Inden	
2	128	Naphthalin	
3	134	Benzo[b]thiophen	
4a	142	2-Methylnaphthalin	
4b	128	Azulen	
5	142	1-Methylnaphthalin	
6	129	Chinolin	
7	154	Biphenyl	
8	129	Isochinolin	
9	156	Dimethylnaphthalin	
10	168	Methylbiphenyl	
11	154	Acenaphthen	
12	152	Acenaphthylen	
13	168	Dibenzofuran	
14	131	Methylindol	oder Methylindolizin
15a	168	Methylbiphenyl	
15b	180	?	kein Stilben, kein Dihydrophenanthren, -anthracen
16	166	Fluoren	
17	153	Azaacenaphthylen	oder Naphthonitril
18	182	Methyldibenzofuran	
19	182	Methyldibenzofuran	
20a	166	Methylacenaphthylen	oder Naphthocyclopentadien
20b	183	?	
21	166	Methylacenaphthylen	oder Naphthocyclopentadien
22	153	Azaacenaphthylen	oder Naphthonitril
23	180	Diphenyläthen	
24a	180	Methylfluoren	
24b	196	?	
25a	180	Methylfluoren	

Tabelle 70, Fortsetzung: Zuordnung der Peaks in den Abbildung 60, 61 und 63

Peak	Molekular-gewicht	Verbindung	Bemerkung
25b	196	?	
26	180	9(?)-Methylfluoren	
27	196	?	
28	167	Azafluoren	oder Methylazaacenaphthylen
29	180	Methylfluoren	
30	167	Azafluoren	oder Methylazaacenaphylen
31	144	1(?)-Naphthol	
32	184	Dibenzothiophen	
33	184	Naphthothiophen	
34	178	Phenanthren	
35	178	Anthracen	
36	198	Methyldibenzothiophen	
37	179	Benzo[h]chinolin	
38	184	Naphthothiophen	
39	192	Methylphenanthren, -anthracen	
40	179	Acridin	
41	192	Methylphenanthren, -anthracen	
42	192	Methylphenanthren, -anthracen	
43	192	Methylphenanthren, -anthracen	
44	190	4H-Cyclopenta[d,e,f]phenanthren	= 4,5-Methylenphenanthren
45	179	Benzo[f]chinolin	
46	204	2-Phenylnaphthalin	
47	179	Azaphenanthren, anthracen	
48	206	Dimethylphenanthren, anthracen	
49	193	Methylbenzochinolin	oder Phenylindol
50	206	Dimethylphenanthren, -anthracen	
51	167	Carbazol	
52	181	Methylcarbazol	
53	202	Fluoranthen	
54	218	Benzonaphthofuran	

Tabelle 70, Fortsetzung: Zuordnung der Peaks in den Abbildungen 60, 61 und 63

Peak	Molekular-gewicht	Verbindung	Bemerkung
55	206	9,10 - Dimethylanthracen	
56	204	Dihydropyren	kein Phenylnaphthalin
57	208	Thiopheno[d,e,f]phenanthren	
58	202	Acephenanthrylen, -anthrylen	
59a	218	Benzonaphthofuran	
59b	167	Naphthopyrrol	
60	202	Pyren	
61	216	Methylfluoranthen, -pyren	
62	216	Methylfluoranthen, -pyren	
63	218	Benzonaphthofuran	
64	204	4H-Cyclopenta[d,e,f]phenanthren-4-on	oder Isomer nach Gold [330]
65	216	Methylfluoranthen, -pyren	
66	216	Methylfluoranthen, -pyren	
67	216	Benzo[a]fluoren	
68	216	Benzo[b]fluoren	
69	216	Benzo[c]fluoren	
70	216	Methylfluoranthen, -pyren	
71	232	Tetrahydroderivat von $C_{18}H_{12}$-Isomeren	
72	216	Methylfluoranthen, -pyren	
73	203	Azafluoranthen, -pyren	oder Cyanophenanthren--anthracen
74	230	Dimethylfluoranthen, -pyren	oder Methylbenzofluoren oder Dihydroderivat von $C_{18}H_{12}$-Isomeren
75	203	siehe Peak 73	
76	230	siehe Peak 74	
77	217	Azabenzofluoren	kein Benzocarbazol
78	230	siehe Peak 74	
79	203	siehe Peak 73	
80	228	Benzo[c]phenanthren	
81	254	1,2'- Binaphthyl	oder Phenylphenanthren, - anthracen

Tabelle 70, Fortsetzung: Zuordnung der Peaks in den Abbildungen 60, 61 und 63

Peak	Molekular-gewicht	Verbindung	Bemerkung
82	191	Pyrrolo[d,e,f]phenanthren	
83a	226	Benzo[m,n,o]fluoranthen	oder Cyclopenta[c,d]pyren
83b	234	Benzonaphthothiophen	
84	229	Azabenzo[c]phenanthren	
85	234	Benzonaphthothiophen	
86	228	Benzo[a]anthracen	
87	228	?	
88	228	Chrysen	
89	228	Triphenylen	
90	229	Azaderivat eines $C_{18}H_{12}$-Isomers	
91	242	Methylderivat eines $C_{18}H_{12}$-Isomers	
92	242	Methylderivat eines $C_{18}H_{12}$-Isomers	
93	242	Methylderivat eines $C_{18}H_{12}$-Isomers	
94	242	Methylderivat eines $C_{18}H_{12}$-Isomers	
95	254	Phenylphenanthren, anthracen	kein Binaphthyl
96	242	Methylderivat eines $C_{18}H_{12}$-Isomers	
97	242	Methylderivat eines $C_{18}H_{12}$-Isomers	
98a	242	Methylderivat eines $C_{18}H_{12}$-Isomers	
98b	254	2,2'- Binaphthyl	
99	240	4H-Cyclopenta[d,e,f]chrysen oder Isomer	
100	240	4H-Cyclopenta[d,e,f]chrysen oder Isomer	
101	240	4H-Cyclopenta[d,e,f]chrysen oder Isomer	
102	230	Benzanthron oderIsomer	
103	217	Benzocarbazol	
104	217	Benzocarbazol	
105a	217	Benzocarbazol	
105b	268	Dinaphthofuran	
106	217	Naphthoindol	
107	252	Benzo[b]fluoranthen	
108a	252	Benzo[j]fluoranthen	
108b	252	Benzo[k]fluoranthen	

Tabelle 70, Fortsetzung: Zuordnung der Peaks zu den Abbildung 60, 61 und 63

Peak	Molekular-gewicht	Verbindung	Bemerkung
109	253	Azabenzofluoranthen	oder Nitril eines $C_{18}H_{12}$-Isomers
110	252	$C_{20}H_{12}$-Isomer	
111	266	Methylbenzofluoranthen	
112	252	Benzo[e]pyren	
113a	252	Benzo[a]pyren	
113b		? der mit SE 54-Kapillaren erhaltene Peak besteht aus mindestens 2 Komponenten	
114	266	Methylbenzofluoranthen, -pyren	
115	266	Methylbenzofluoranthen, -pyren	
116	252	Perylen	
117a	266	Methylbenzofluoranthen, pyren	
117b	278	Dibenzophenanthren, -anthracen	
118	266	Methylbenzofluoranthen, pyren	
119a	264	Methylenbenzofluoranthen, -pyren	
119b	253	Azaderivat eines $C_{20}H_{12}$-Isomers	oder Cyanoderivat eines $C_{18}H_{12}$-Isomers
120	254	6H-Benzo[c,d]pyren-6-on	oder Isomer; Gold[5438]
121a	284	Dinaphthothiophen	
122	279	Dibenzoacridin	oder Isomer
123	278	Dibenzophenanthren,	
124	284	Dinaphthothiophen	
125a	278	Dibenzophenanthren,	
125b	284	Dinaphthothiophen	
126	279	Dibenzoacridin	oder Isomer
127	278	Dibenzophenanthren, -anthracen	
128	276	Indenofluoranthen	
129	278	Dibenzo[a,h]- und/oder Dibenzo[a,c]anthracen	
130	276	Indeno[1,2,3-c,d]pyren	
131	278	Benzo[b]chrysen	

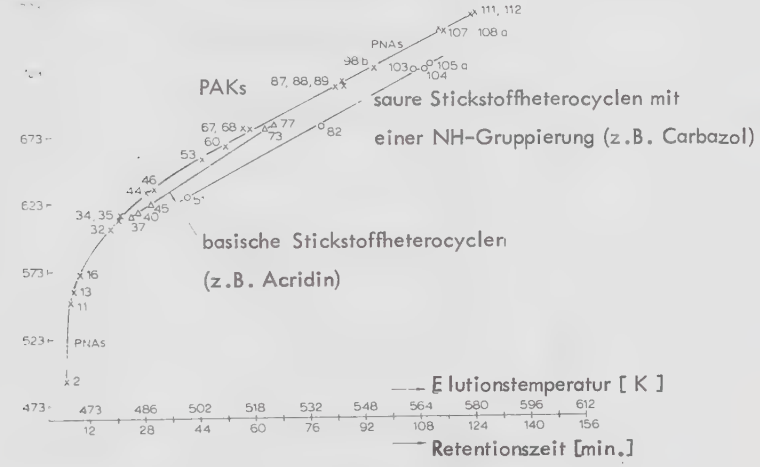
Tabelle 70, Fortsetzung: Zuordnung der Peaks zu den Abbildungen 60, 61 und 63

Peak	Molekular-gewicht	Verbindung	Bemerkung
132	267	Dibenzocarbazol	
133	278	Picen	
134	276	Benzo[g,h,i]perylen	
135	276	Anthanthren	
136	290	Methylderivat eines $C_{22}H_{12}$-Isomers	Methylenderivat eines $C_{22}H_{14}$-Isomers
137	302	Dibenzofluoranthen, -pyren	
138	302	Dibenzofluoranthen, -pyren	
139	302	Dibenzofluoranthen, -pyren	
140a	300	Coronen	
140b	300	$C_{24}H_{12}$-Isomer	
141	302	Dibenzofluoranthen, -pyren	

Abbildung 62: Abhängigkeit der Siedepunkte von polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (x), basischen Stickstoffheterocyclen (Δ) und sauren Stickstoffheterocyclen (o) von der Elutionstemperatur bei temperaturprogrammierter Arbeitsweise

Stationäre Flüssigkeit : Poly S 179

übrige GC-Bedingungen: siehe Abbildung 61a



Zuordnung der Peaks : Tabelle 70

Siedepunkte der Verbindungen: Lang u. Eigen

Abbildung 63, siehe nächste Seite:

Parallelelddetektion von polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen und ihren Stickstoffderivaten im Steinkohlenteer

Probe	: Steinkohlenhochtemperaturteer
Säule	: Länge 50 m, i.D. 0,27 mm; HCl-/H_2O_/HF-behandelt
Statonäre Flüssigkeit	: Dexsil 400 (Methyl-/Phenylpolycarboransiloxan
Filmdicke	: 86 nm
Säulentemperatur	: 50 - 320 °C, 4°C/min
Trägergas	: Helium, 0,33 m/sec bei 320 °C
Detektion	: Kapillarsäule — FID / N - FID
Zuordnung	: Tabelle 70

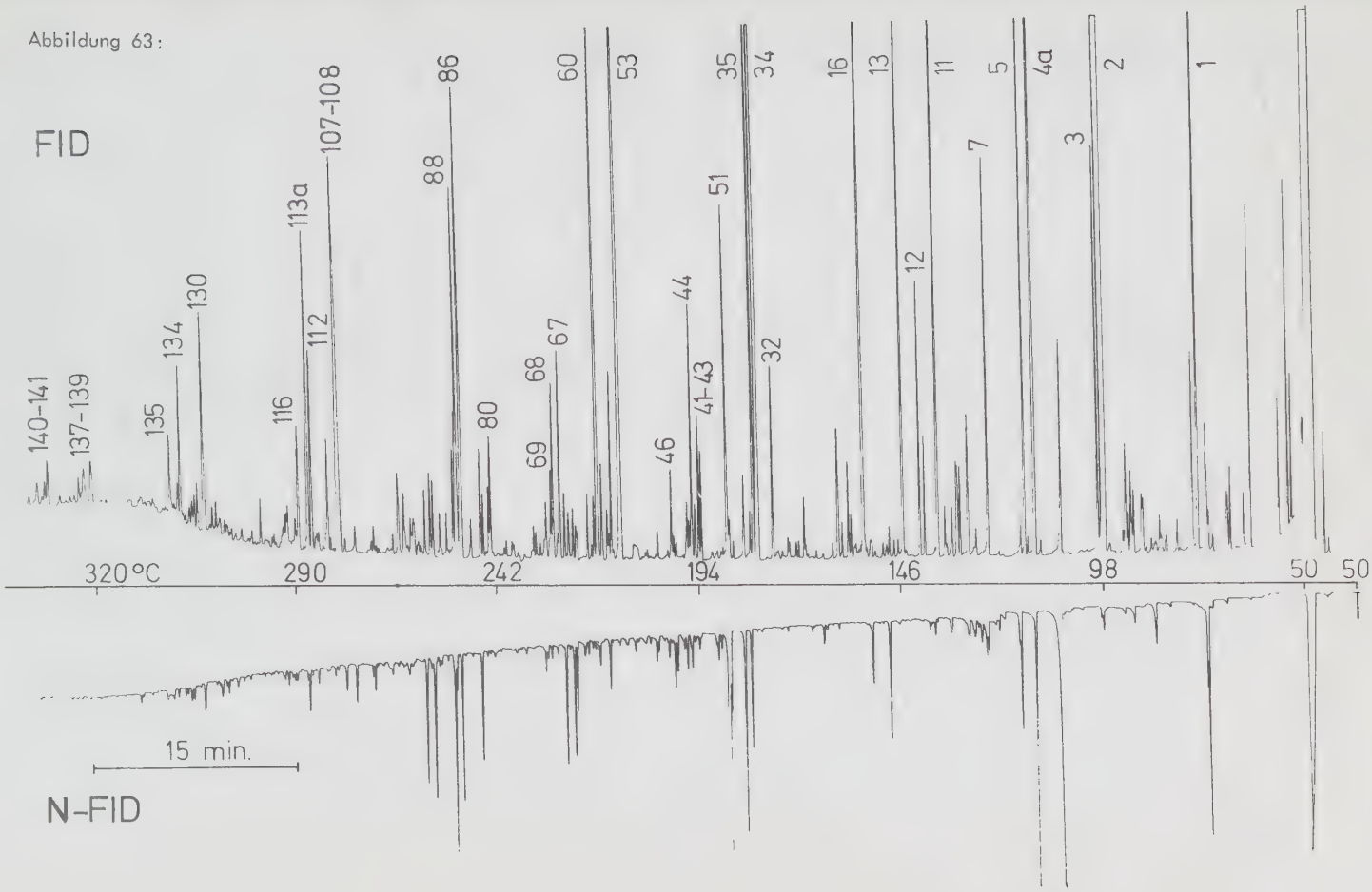



Abbildung 63: